

fizikai szemle



2009/7–8

**Az Eötvös Loránd Fizikai Társulat
havonta megjelenő folyóirata.
Támogatók: A Magyar Tudományos
Akadémia Fizikai Tudományok Osztálya,
az Oktatási és Kulturális Minisztérium,
a Magyar Biofizikai Társaság,
a Magyar Nukleáris Társaság
és a Magyar Fizikushallgatók Egyesülete**

Főszerkesztő:

Szatmáry Zoltán

Szerkesztő bizottság:

**Bencze Gyula, Czitrovszky Aladár,
Faigel Gyula, Gyulai József,
Horváth Gábor, Horváth Dezső,
Iglói Ferenc, Kiss Ádám, Lendvai János,
Németh Judit, Ormos Pál, Papp Katalin,
Simon Péter, Sükösd Csaba,
Szabados László, Szabó Gábor,
Trócsányi Zoltán, Turiné Frank Zsuzsa,
Ujvári Sándor**

Szerkesztő:

Füstöss László

Műszaki szerkesztő:

Kármán Tamás

A folyóirat e-mailcíme:

szerkesztok@fizikaiszemle.hu

A lapba szánt írásokat erre a címre kérjük.

A folyóirat honlapja:

<http://www.fizikaiszemle.hu>

A címlapon:

**Negyven évvel ezelőtt fordult elő első
alkalommal, hogy az ember szilárd
talajon állva nézhette a távoli Földet.**

TARTALOM

<i>Hraskó Péter:</i> A fizika axiomatizálásáról	229
<i>Vancsó Péter, Bíró László Péter, Márk Géza István:</i> Kvantum fónix – hullámcsomag-dinamika az interneten	233
<i>Kiss Péter, Csabai István, Lichtenberger János, Jánosi Imre:</i> Kozmikus sugárzás, időjárás, éghajlat: hol a hiányzó láncszem?	238
<i>Házi Gábor:</i> A rács-Boltzmann módszer	244
<i>Hargittai Magdolna, Hargittai István:</i> Nevek és hírnevek – Herzberg, Jahn, Renner, Teller és az elektron–rezgési kölcsönhatások	247
<i>Füstöss László:</i> Száz éve született Gombás Pál	251
A FIZIKA TANÍTÁSA	
<i>Beke Tamás:</i> Termoakusztikus projektfeladat Rijke-cső vizsgálatára	253
<i>Kopasz Katalin, Papp Katalin, Szabó M. Gyula, Szalai Tamás:</i> Üstökös az asztalon – Hogyan „főzzünk” csillagászati demonstrációs eszközöket?	257
<i>Jendrék Miklós:</i> Minden, ami ellenállás	260
Hogyan készítettem töltésmegkülönböztető elektroszkópot? (<i>Czétényi Benjámin</i>)	265
52. Középiskolai Fizikatanári Ankét és Eszközbemutató (<i>Kopcsa József</i>)	266
<i>Vannay László, Fülöp Ferenc, Máthé József, Nagy Tamás:</i> A Fizika Országos Középiskolai Tanulmányi Verseny harmadik fordulója, a második kategória részére	270
<i>Szatmáry Károly:</i> Egy „nem hivatalos” tanulmányi verseny sikeréről: a Galilei Országos Csillagászati Diákvetélkedő	275
Fogolydilemma és tojáshej-csontimplantátum az MFA nyári kutatótáborában	277
<i>Gyulai József:</i> Élt 65 évet... – Requiem egy tanszékért	278
<i>Hartmann Ervin:</i> BME Kísérleti Fizikai Tanszék 65 éve	278
VÉLEMÉNYEK	
<i>Theisz György:</i> Gondolatok az iskolai energiafoglalomhoz	281
KÖNYVESPOLC	283
HÍREK – ESEMÉNYEK	286
<i>P. Hraskó:</i> The axiomatization of physics	
<i>P. Vancsó, L. P. Bíró, G. I. Márk:</i> Quantum phoenix – the dynamics of wave groups on internet	
<i>P. Kiss, I. Csabai, J. Lichtenberger, I. Jánosi:</i> Cosmic rays, weather, climate – where to look for the missing link?	
<i>G. Házi:</i> The grid-Boltzmann method	
<i>M. Hargittai, I. Hargittai:</i> Names and fames: Herzberg, Jahn, Renner, and Teller, and the vibronic interactions	
<i>L. Füstöss:</i> The P. Gombás centenary	
TEACHING PHYSICS	
<i>T. Beke:</i> The study of Rijke-tubes	
<i>K. Kopasz, K. Papp, M. G. Szabó, T. Szalai:</i> Comet on the table – How to “cook” astronomic demonstration equipments	
<i>M. Jendrék:</i> Everything behaving like a resistor	
How I made an electroscope discerning the charge sign (<i>B. Czétényi</i>)	
52nd Meeting and Equipment Show of physics teachers (<i>J. Kopcsa</i>)	
<i>L. Vannay, F. Fülöp, J. Máthé, T. Nagy:</i> The 3rd round (2nd category) of the secondary school pupils’ contest in physics	
<i>K. Szatmáry:</i> A “non-official” but successful contest: the “Galileo” Astronomical Contest	
The summer research camp of MFA	
<i>J. Gyulai:</i> 65 years alive – an obituary of a TU department	
<i>E. Hartmann:</i> 65 years of the Department for Experimental Physics of the Technical University at Budapest	
OPINIONS, BOOKS, EVENTS	
<i>P. Hraskó:</i> Über die Axiomatisierung der Physik	
<i>P. Vancsó, L. P. Bíró, G. I. Márk:</i> Quanten-Phönixe – die Dynamik von Wellengruppen im Internet	
<i>P. Kiss, I. Csabai, J. Lichtenberger, I. Jánosi:</i> Kosmische Strahlung, Wetter, Klima – wo ist das fehlende Glied der Kette zu suchen?	
<i>G. Házi:</i> Die Gitter-Boltzmann-Methode	
<i>M. Hargittai, I. Hargittai:</i> Persönlichkeiten und Phänomene: Herzberg, Jahn, Renner, Teller, und die Wechselwirkungen aufgrund von Elektronen-Schwingungen	
<i>L. Füstöss:</i> P. Gombás vor hundert Jahren geboren	
PHYSIKUNTERRICHT	
<i>T. Beke:</i> Die Untersuchung von Rijke-Röhren	
<i>K. Kopasz, K. Papp, M. G. Szabó, T. Szalai:</i> Komet auf dem Tisch – wie “kocht” man astronomische Demonstrations-Objekte	
<i>M. Jendrék:</i> Alles, was sich wie ein Widerstand verhält	
Ein Elektroskop, das das Vorzeichen der Ladung aufzeigt (<i>B. Czétényi</i>)	
52. Landestreffen und Ausstellung der Physiklehrer (<i>J. Kopcsa</i>)	
<i>L. Vannay, F. Fülöp, J. Máthé, T. Nagy:</i> Die dritte Runde (zweite Kategorie) des Schüler Wettbewerbs in Physik	
<i>K. Szatmáry:</i> Ein erfolgreicher „inoffizieller” Wettbewerb: Der Galilei-Wettbewerb in Astronomie	
Das Sommerlager des MFA	
<i>J. Gyulai:</i> 65 Jahre am Leben – Requiem für einen Lehrstuhl	
<i>E. Hartmann:</i> 65 Jahre des Lehrstuhls für Experimentalphysik der TU Budapest	
MEINUNGSÄUSSERUNGEN, BÜCHER, EREIGNISSE	
ВНИМАНИЕ! По техническим причинам русская часть оглавления печатается отдельно на конце журнала.	

KVANTUM FŐNIX – HULLÁMCSOMAG-DINAMIKA AZ INTERNETEN

Vancsó Péter, Biró László Péter, Márk Géza István
MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet
Nanoszerkezetek Osztály

A kvantummechanika ismerete alapvető fontosságú, hogy megértsük a körülöttünk lévő természetet, annak működését. Az elektronok mozgásának, az atomok és molekulák tulajdonságainak leírásához a klasszikus fizika törvényei (már) nem elegendők. Habár az a mikroszkopikus méret- és időtartomány, amelyben a kvantummechanika törvényei érvényesek, távol esik emberi világunk méret- és időskálájától, ez a tudomány mégsem csupán a kutatók birodalma. A 21. század elején az embereket a mindennapokban körülvevő modern technikai eszközök [1] – például tranzisztor, lézer – működésének megértésénél is nélkülözhetetlenek a kvantummechanikai ismeretek. Ezeknek az ismereteknek az átadása az oktatás feladata, legyen szó középiskolai vagy egyetemi szintű oktatásról [2].

A kvantummechanika oktatása az egyik legnehezebb feladat a fizika tanítása folyamán, mivel a diákok túl absztraktnak, matematikailag túl bonyolultnak tartják [3]. Ez érthető is, ha végiggondoljuk, hogy a

klasszikus fizika fogalmkörének és törvényeinek megértésénél segítségünkre vannak mindennapi tapasztalataink, mindenki által könnyen elvégezhető kísérletek. Ezzel szemben a kvantummechanika mérettartományában végzett mérések többnyire közvetettek és nehezen értelmezhetőek.

Matematikai szempontból ahhoz, hogy klasszikus mechanikai leírását adjuk egy részecske (tömegpont) mozgásának, 6 paramétert kell megadnunk: $\mathbf{r}(t)$ és $\mathbf{p}(t)$, azaz a hely és a lendület x , y és z komponensét az idő függvényében. Ezek határozzák meg a többi dinamikai változót, például az energiát. A Newton-törvények ismeretében kiszámíthatjuk az $\mathbf{r}(t)$ és $\mathbf{p}(t)$ függvények értékeit minden pillanatra, ha ismerjük a függvények értékét valamely tetszőleges t_0 kezdeti pillanatban, azaz adottak az $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}(t_0)$ és $\mathbf{p}_0 = \mathbf{p}(t_0)$ kezdeti hely- és lendületértékek, továbbá ismerjük a részecskére ható erőket. A kvantummechanikai leírás mód ennél bonyolultabb. A részecske állapotát t pillanatban egy hullámfüggvény adja meg, $\Psi(\mathbf{r}, t)$, amely

tartalmazza az összes információt, amit a részecskéről tudni lehet. Látható tehát, hogy a 6 paraméter helyett, most végtelen számú paraméterünk van: a ψ $3+1=4$ változós függvény értékei a tér minden pontjában, minden időpontban. A $\psi(\mathbf{r}, t)$ függvényt valószínűségi amplitúdónak nevezzük, mert

$$\rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}^3 = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r}^3$$

annak a valószínűségét adja meg, hogy a részecske t időpontban egy \mathbf{r} pont körüli $d\mathbf{r}^3$ térfogatelemben található, $\rho(\mathbf{r}, t)$ pedig a megtalálási valószínűségi sűrűség. A hullámfüggvény időfejlődését az időfüggő Schrödinger-egyenlet írja le, amely egy homogén lineáris parciális differenciálegyenlet:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\mathbf{r}, t).$$

Ez az az egyenlet, amely mai ismereteink szerint az atom- és molekulafizika, a szilárdtestfizika, sőt a kémia és a biológia összes (nem-relativisztikus) jelenségét kormányozza. Következésményeit számtalan kísérlet igazolta az egyenlet megalkotása óta eltelt több, mint 80 év folyamán.

A Schrödinger-egyenlet determinisztikus; adott $\psi_0(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}, t=t_0)$ kezdőállapot esetén a hullámfüggvény kiszámítható bármely t időpontra. A véletlenszerűség, az indeterminizmus, a fizikai mennyiség mérése folyamán jelenik meg a kvantummechanikában. A Schrödinger-egyenlet megoldásához a kezdő állapot ismeretén kívül szükséges az adott fizikai rendszert meghatározó \mathbf{H} Hamilton-operátor. Konzervatív rendszerek esetén $\mathbf{H} = \mathbf{K} + \mathbf{V}$, ahol \mathbf{K} a kinetikus, \mathbf{V} pedig a potenciális energia operátora, tehát a rendszert végső soron a \mathbf{V} potenciáloperátor írja le. Ha ez a potenciál lokális, akkor a potenciális energia operátor hatása egy egyszerű $V(\mathbf{r})$ potenciálfüggvénnyel adható meg.

Látható tehát, hogy a kvantummechanika matematikai nyelvezetének megértése szintén nem egyszerű feladat, és további probléma, mint említettem, hogy a jelenségeket nem tudja a diák a mindennapi tapasztalataihoz kapcsolni – $\psi(\mathbf{r}, t)$ komplex értékű függvény(!) –, a mérések pedig mindig közvetettek: maga a hullámfüggvény nem mérhető, csak a belőle származtatott mennyiségek, az úgynevezett megfigyelhető mennyiségek, mint például $\langle \mathbf{r} \rangle$, a hely várható értéke:

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \langle \psi | \mathbf{r} | \psi \rangle = \int \int \int \psi^* \mathbf{r} \psi dx dy dz.$$

Ahhoz, hogy mégis szemléletes képet tudjunk adni a diákoknak a Schrödinger-egyenlet „működéséről”, egy nagyon hasznos eszközt alkalmazhatunk: a számítógépes szimulációt. A mai személyi számítógépek sebessége és tárolókapacitása már bárki számára lehetővé teszi egyszerű kvantummechanikai rendszerek numerikus vizsgálatát. Ha például a háromdimenziós hullámfüggvényt egy x, y, z -ben egyaránt 256 pontból álló felosztáson modellezzünk, a hullámfüggvény (duplapontos komplex) tárolásához 256 Megabyte tárolókapacitás szükséges – egy mai köznapi PC-ben

általában több mint 1024 Megabyte memória található. Ha a számítást két dimenzióra korlátozzuk és/vagy kihasználjuk az adott rendszer szimmetriáit, akkor még kevesebb memória elegendő a számításokhoz.

Web-Schrödinger

Az MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet Nanoszerkezetek Osztályán, belga kutatókkal együttműködésben kifejlesztett Web-Schrödinger egy olyan interaktív számítógépes szimuláció, amely szemléletesen teszi az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldását. A numerikus számítás maga egy alkalmazsszerveren fut, így a felhasználónak nem kell telepíteni semmit a saját számítógépén, egyszerű web-böngésző segítségével használhatja a programot (<http://www.nanotechnology.hu/online/web-schroedinger/index.html> címen). A program interaktív voltából adódóan pedig a felhasználó betöltheti az előre elkészített példákat, és változtathat azok beállításain, továbbá készíthet teljesen új példákat, amelyek mentése szintén lehetséges. Ahhoz, hogy megértsük hogyan „kormányozhatja a hullámfüggvényt” a felhasználó a szimuláció során, kicsit részletesebben meg kell ismerkednünk a programmal.

A szimuláció három lépésből áll:

- Először meg kell határozni a $\psi_0(\mathbf{r})$ kezdőállapot- és a $V(\mathbf{r})$ potenciálfüggvényeket, és beállítanunk néhány számolási paramétert, mint például a szimulált időintervallumot.
- Ezután a program kiszámítja a hullámfüggvény időfejlődését.
- Végül megjeleníti a megtalálási valószínűség időfejlődését.

A hullámcsomag-dinamikai módszer

Erwin Schrödinger 1926-ban [4] azzal a céllal alkotta meg a kvantummechanikai hullámcsomag fogalmát, hogy hidat építsen a klasszikus és a kvantummechanika között. A hullámcsomag egy térben lokalizált hullámfüggvény, azaz olyan kvantumállapotot ír le, amikor a részecske nagy valószínűséggel egy adott pont közelében található. A Schrödinger-egyenletből levezethető, hogy a hullámcsomag tömegközéppontja jó közelítéssel úgy mozog, mint egy klasszikus tömegpont, ha a potenciál lassan változik a hullámcsomag méretéhez képest. A hullámcsomag leggyakrabban alkalmazott formája a Gauss-hullámcsomag – a Web-Schrödinger program is ezt használja kezdőállapotként:

$$\psi_0(\mathbf{r}) = N \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}) \exp\left(-\frac{[\mathbf{r} - \mathbf{r}_0]^2}{a^2}\right),$$

ahol $\mathbf{k}_0 = (2\pi/\lambda)\mathbf{n}$ a hullámcsomag hullámszámvektora, λ a de Broglie hullámhossz, a pedig a hullámcsomag szélessége – minél nagyobb a , annál szélesebb a hullámcsomag. Az \mathbf{n} vektor a részecske haladási irá-



File	Edit	Time development	Results	Help & more
Mesh	Potential	Initial state	Calculation parameters	

Mesh parameters
 $E_0 = 384$, $E_1 = 384$, $\omega_0 = -64 \text{ \AA}$, $\omega_1 = -64 \text{ \AA}$, $\omega_2 = 328 \text{ \AA}$, $\omega_3 = 328 \text{ \AA}$

Objects

Def	shape	V _{min}	V _{max}	x ₁	x ₂	y ₁	y ₂
Def1	circle	4.81	0	0	0	0	0
Def2	circle	4.81	0	0	0	0	0
Def3	circle	4.81	0	0	0	0	0
Def4	circle	4.81	0	0	0	0	0
Def5	circle	4.81	0	0	0	0	0

Grayscale image of the 2D potential

- Click the checkboxes before the object to remove the object
- Give object potential values in eV
- Give all length values in Angstroms
- Give the angle in Degree

1. ábra. STM tű – szén nanocső – hordozó felület potenciál konstukciója a Web-Schrödingerben – a Web böngésző ablakából kimentett képernyőkép. Láthatjuk, hogyan lehet összerakni az STM leképezés szimulációjához használt potenciált a különféle objektumokból. A jobboldali kép az így elkészült potenciált mutatja: a fehér szín a nulla potenciál, a fekete $-9,81 \text{ eV}$, ezt a potenciálkád mélységet a grafit Fermi-energiájából és kilépési munkájából számítottuk ki, lásd [5]. A nanocső átmérője 1 nm , ez megfelel egy tipikus egyfalú szén nanocső átmérőjének. A méreteket a programban ángströmökben ($1 \text{ \AA} = 0,1 \text{ nm}$), az energiákat elektronvoltban kell megadni.

nyát adja meg, N pedig egy normálási faktor. A hullámszám a részecske lendületéből így számítható ki: $\mathbf{k}_0 = \mathbf{p}_0/\hbar$, $\hbar = h/2\pi$, ahol h a Planck-állandó. \mathbf{r}_0 adja meg a részecske helyét – a negatív kitevőjű exponenciális függvény miatt ezen a helyen maximális a ψ hullámfüggvény abszolút értéke, \mathbf{r}_0 -tól távolodva gyorsan csökken. Mivel $\rho = |\psi|^2$ adja a megtalálási valószínűségeket a hely függvényében, azonnal láthatjuk, hogy a Gauss-hullámcsomag valóban lokalizált állapotot ír le: a részecske megtalálási valószínűsége az \mathbf{r}_0 pontban a legnagyobb, attól távolodva rohamosan csökken – lásd a 2. ábrát!

Mint azt korábban részletesen leírtuk [5], a hullámcsomag-dinamikai módszerben egy adott potenciáltérben vizsgáljuk meg a hullámcsomag mozgását (szimulált szórás kísérlet). Ennek szemléltetése pedig kiemelkedő fontosságú, ugyanis a diákok nehezen tudják elképzelni, hogyan terjed egy elektron, mi történik, ha potenciálgáttal érintkezik, hogyan megy végbe a kölcsönhatás stb.

Paraméterek

Elsőként a felhasználó a számolási doboz méretét, illetve annak felosztását tudja beállítani. Jellegzetes nanofizikai alkalmazásoknál a számolási doboz mérete néhány nanométer, a felosztást pedig úgy kell megadni, hogy a szimulációban előforduló de Broglie hullámokat jól mintavételezze. Elektronvolt nagyságrendű energiáknál ez – elektronra – $0,01\text{--}0,1 \text{ nm}$ lépésközt jelent.

A második lépés a potenciálfüggvény megadása, voltaképpen ezzel határozzuk meg azt a fizikai rendszert, amelyet vizsgálni akarunk. A különböző potenciálokkal vagyunk tehát képesek különböző jelenségek szemléltetésére, mint például az alagutazás folyamata, a tiltott és megengedett sáv kristályokban, dobozba zárt részecske stb.

Háromfajta potenciál „építőköve” közül választhatunk; a kör, a téglalap és a félsík, amelyeket tetszőleges módon és számban helyezhetünk el a számolási dobozban, természetesen értékeik megadásával, ezáltal széles alkalmazási spektrumot kínálva a felhasználóknak. Az 1. ábrán, amely egy, a programból kimentett képernyőkép, láthatjuk, hogyan lehet bonyolult potenciálokat is egyszerűen felépíteni a programmal: ezen a képen egy szén nanocső pásztázó alagútmikroszkópos leképezésének szimulációjánál használt potenciált [5] mutatunk be. Az 1. ábrán az STM-tű – nanocső – hordozó felületnek a csőre merőleges keresztmetszetét láthatjuk: az alsó fekete félsík a hordozót, a középső gyűrű a nanocsövet (amely a Van der Waals potenciálon „lebeg” a hordozó fölött, körülbelül $0,335 \text{ nm}$ távolságra), a felső félsík a félkör alakú kiemelkedéssel az alagútmikroszkóp tujét szimulálja. Az STM leképezésnek ezzel az egyszerű, geometriai modelljével számos kísérleti eredmény vált értelmezhetővé, amelyekről részletesen az alábbi cikkekben lehet olvasni [5–7].

A következő lépés a kezdeti hullámcsomag paramétereinek megadása. Itt tudja a felhasználó a hullámcsomag kezdeti helyét, kinetikus energiáját, szélességét és még egyéb, ehhez kapcsolódó adatokat beállítani.

Végül a már említett számolási lépésközt (δt) és a szimulált időtartamot adhatjuk meg. A számolás eredményét a program képek formájában jeleníti meg (results menüpont). A képeken a megtalálási valószínűsége sűrűség, $\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ időfüggése látható.

Megismerkedvén lehetőségeinkkel, a cikk következő részében néhány példával szeretnénk bemutatni a program működését (ezek szintén megtalálhatóak a „példák” menüpont alatt).

Példák

Alagúteffektus

A klasszikus fizika törvényei szerint egy E energiával rendelkező részecske nem tud behatolni $V > E$ potenciállal rendelkező térrészbe, ez számára ugyanis tiltott tartomány. Ennek szemléletes példája a mély gödör alján lévő, abból kigurulni nem tudó labda esete. A kvantummechanika azonban mást mond: hullámtulajdonságából kifolyólag a részecskének van egy véges valószínűségű esélye arra, hogy áthaladjon az energiáját meghaladó „magasságú” potenciálfalon. Ezt a jelenséget nevezzük alagúteffektusnak, ennek nem egy megjelenési formájával találkozhatunk a természetben és a technikában, a radioaktív bomlástól a villanykapcsoló működéséig. A Web-Schrödingerrel most ezt a jelenséget szeretnénk bemutatni.

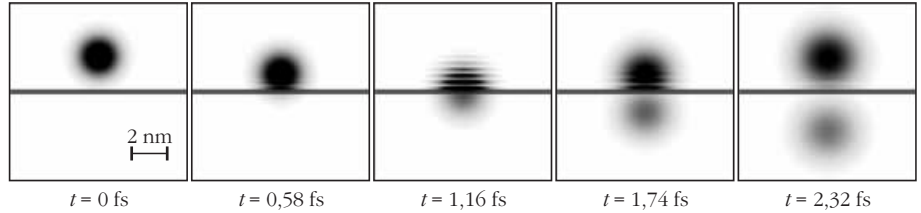
A beállítások kritériuma, hogy a potenciálfal magassága legyen nagyobb a hullámcsomag energiájánál. Ekkor az áthaladási valószínűség jó közelítéssel

$$T \sim e^{-2\kappa d},$$

ahol κ paraméter a részecske tömegéből, energiájából, illetve a potenciál nagyságából számítható. Innen

már látszik, hogy nem érdekes a potenciállal szélességét túl nagyra választani, mert akkor az átjutás mértéke túlságosan csökkenhet, ezáltal a jelenség kevésbé szemléletes. A példában a potenciál értéke $V = 7$ eV, a kezdeti energia pedig $E = 5$ eV. A potenciál vastagsága $d = 2$ Å. Ezekkel az értékekkel az átmeneti valószínűsége $T = 0,17$ értéket kapunk a fenti képletből, a visszaverődési valószínűség tehát $R = 1 - T = 0,83$.

A megtalálási valószínűsége időfejlődése a 2. ábrán látható. Mivel a kezdeti hullámcsomagnak egy $-y$ („lefelé”) irányú lendületet adtunk, megfigyelhetjük, hogy időfejlődése során a $-y$ irányba halad – amíg csak el nem éri a potenciálfalat. A további képek azt mutatják, ahogyan a hullámcsomag kölcsönhatásba lép a potenciálfallal, az utolsó kép pedig a kölcsönhatás lezajlása utáni végállapotot ábrázolja. A teljes folyamat $2,32$ fs = $2,32 \cdot 10^{-15}$ s időt vesz igénybe. A vízszintes csíkokat a visszavert és beérkező hullámok interferenciája okozza. Látható hogy bár a részecske elég nagy eséllyel visszaverődik, mégis véges valószínűséggel átjuthat a potenciálfalon (szürke folt a potenciál túloldalán). Így tehát szemléletes képet sikerült alkotnunk az alagutazás folyamatáról.



2. ábra. Hullámcsomag alagutazása, a $\rho(x,y;t)$ megtalálási valószínűsége függvény különböző pillanatokra. A felülről lefelé haladó kezdeti hullámcsomag nekiütközik az E energiájánál nagyobb V_0 magasságú potenciálfalnak. Az áthaladás valószínűségét (az alagutazást) a potenciálfal túloldalán megjelenő hullámcsomag mutatja, a potenciálfal felső oldalán pedig a visszavert hullámcsomagot láthatjuk. A vízszintes sötét sáv a potenciálfalat jelképezi. A szürkeskálájú ábrázolásban a sötétszürke jelenti a legnagyobb, a fehér a nulla megtalálási valószínűséget. Nemlineáris szürkeskálát alkalmaztunk, hogy a nagyobb és kisebb megtalálási valószínűségértékek egyaránt jól látszanak az ábrán.

A 3. ábrán bemutatott szimulációban a potenciálok megegyeznek, de a kezdeti állapotok energiái eltérőek, így szemléltetve a tiltott és megengedett sáv hatását. Láthatjuk, hogy a szimulációban a tiltott sáv esetén is van egy kis áthaladás és a megengedett sáv esetén is egy kis visszaverődés. Ez abból adódik, hogy a hullámcsomag nem egy energia-sajátállapot, azaz van egy bizonyos ΔE energiaszórása. Ezért a tiltott (megengedett) sávba eső hullámcsomag – kis valószínűséggel – áthaladhat (visszaverődhet) a kristály-potenciálon. A hullámcsomag ΔE energiaszórását természetesen tetszőleges mértékben csökkenthetjük, de ez csak azon az áron lehetséges, hogy a Δr térbeli kiterjedését megnöveljük (azaz egyre inkább közelítünk a síkhullám határesethez). Ám a hullámcsomag térbeli kiterjedésének növelése megnöveli a számolási doboz méretét is.

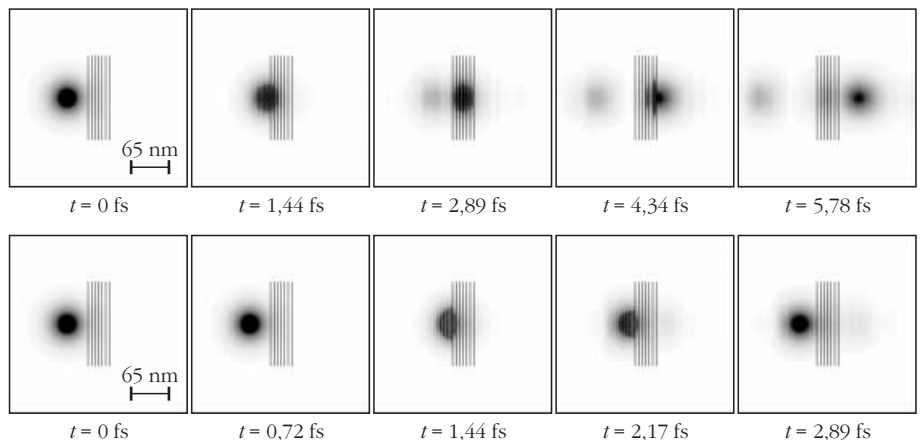
Tiltott és megengedett sáv kristályokban

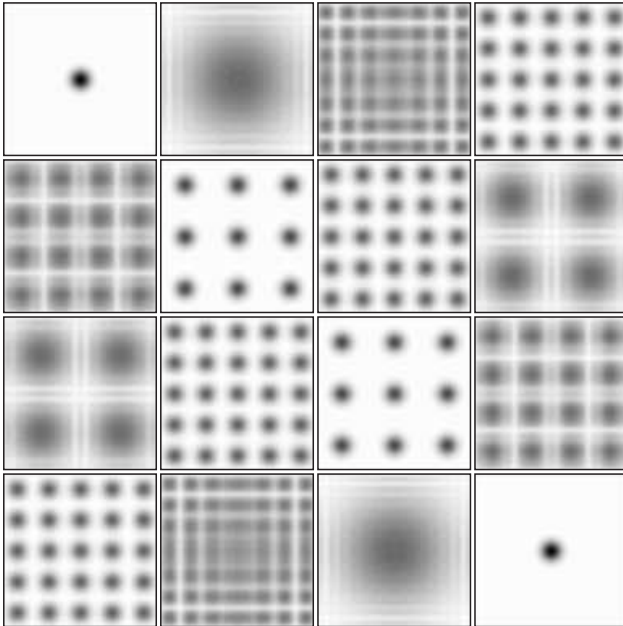
Az ideális kristály a térben ismétlődő, azonos szerkezetű egységekből álló rendszer. Ha egy hullám, amelynek hullámhossza összemérhető a kristály periodicitásával, kölcsönhatásba lép a kristállyal, akkor fellép a diffrakció jelensége. A diffrakció pedig erősen függ a hullámhossztól, ezáltal bizonyos hullámhosszú hullámok át tudnak hatolni a kristályon (megengedett sáv), míg mások visszaverődést szenvednek (tiltott sáv). Ha elektronok szóródnak, akkor ez a jelenség alakítja ki többek között az elektronok sávszerkezetét – ezen alapul a félvezető eszközök működése –, látható fény szóródásánál pedig különböző színek megjelenését tapasztalhatjuk. Azokat a kristályokat, amelyek periodicitása a látható fény hullámhosszának nagyságrendjébe esik, fotonikus kristályoknak nevezzük, és bizonyos ásványoknál és élőlényeknél ez okozza a szín-pompás megjelenést. Ezzel részletesen az alábbi cikk foglalkozik [8].

A kvantum főnix

A szabad térbeli kvantummechanikai hullámcsomag – azaz, ha a részecske nem hat kölcsön semmi mással – alapvető tulajdonsága a szétfolyás, azaz a megtalálási valószínűség az idő előrehaladtával egyre nagyobb térrészre terjed ki. Megfelelő potenciál alkalmazásával

3. ábra. Megengedett és tiltott sáv. A felső sorban a bejövő hullámcsomag energiájának középértéke 10,61 eV, amely a megengedett sávba esik, ezért a hullámcsomag áthalad a kristályon. Az alsó sorban az energia 14,88 eV, ez egy, a tiltott sávba eső érték, ezért a hullámcsomag visszaverődik. Szürke színnel továbbra is a hullámcsomag megtalálási valószínűsége ábrázoltuk, a sötét vonalak pedig a kristály periodikus potenciálját mutatják. A kristály ebben a szimulációban hét darab, 0,53 Å vastag, 9,81 eV magas potenciálfalból állt, amelyek 5,3 Å távol vannak egymástól. A szórási folyamat a kisebb energiájú hullámcsomag esetén lassabb.





4. ábra. 7 nm széles dobozba zárt részecske időfejlődése látható a képeken, amely jól meghatározott idő – esetünkben 71 fs – után ismét felveszi a kezdeti állapotot, azaz újjászületik. Ennek az időnek a tört részeinél ($1/2$, $1/3$, $1/4$...) a tört újjászületések ($2\times$ -es, $3\times$ -os, $4\times$ -es) figyelhetők meg. Az időfejlődést egy újjászületési periódus (revival time) hosszúságban ($T_R = 71$ fs) szimuláltuk és $T_R/15$ időközönként mintavételeztük. A $3/15$ és $6/15$ képeken az ötszörös, az $5/15$ képen a háromszoros újjászületést figyelhetjük meg. A mintázatok $T_R/2$ időtől fordított sorrendben ismétlődnek. A kétszeres újjászületést nem látjuk, mert a $T_R/2$ idő nem esik pontosan egyik időfelosztás pontra sem. De a $7/15$ és $8/15$ képeken megfigyelhetjük a hullámcsomag alakját a kétszeres rekonstrukció előtt és után kis idővel.

azonban megfordíthatjuk ezt a folyamatot! Azt a jelenséget, amikor a kezdeti hullámcsomag időfejlődése folyamán újra kialakul a kezdeti állapot, quantum revivalnek (kvantumállapot újjászületés) nevezzük. Egy végtelesen mély potenciáldoboz esetén a folyamat érdekessége továbbá, hogy az a periódusidő, ami alatt a hullámfüggvény visszatér kezdeti állapotába, független a kezdeti hullámcsomag paramétereitől, csak a doboz méretei határozzák meg, ami szöges ellentétben áll a klasszikus szemlélettel. Ezt nevezik revival-paradoxonnak, további részletek erről az alábbi cikkben található [9]. Érdemes megemlíteni, hogy hasonló jelenség (Talbot-effektus) már 1836 óta ismert az optikában!

A kvantumállapot újjászületés bemutatásához a „dobozba zárt részecske” modelltől indulunk ki, amelyben a hullámcsomag egy kétdimenziós potenciálgödörbe van lokalizálva. $\rho(x,y;t)$ időfejlődését láthatjuk a 4. ábrán, ahol a szimuláció teljes időtartama egy újjászületési periódus. Megfigyelhetjük, hogy a kezdeti hullámcsomag először elkezd szétfolyni, majd visszaverődik a potenciálfalról, interferencia-mintázatok alakulnak ki. A szimuláció végére rekonstruálódik a kezdeti állapot. Ám a közbeni időkben is bámulatosan érdekes jelenséget figyelhetünk meg, a többszörös (tört) újjászületéseket: a kezdeti hullámcsomag több példányban rekonstruálódik a potenciáldoboz különböző helyein. A többszörös újjászületések szimmetriaszerkezetét a $V(\mathbf{r})$ potenciál szimmetriája szabja meg. Mivel a 4. ábrán a potenciál x és y irányban szimmetrikus, a kezdeti hullámcsomag x

és y irányban is megismétlődik. Mint a hátsó borítón látható színes kép bemutatja, az újjászületés és a többszörös újjászületések bonyolult alakú hullámcsomagok esetén is bekövetkeznek. A 4. ábrán a fehér felel meg a nulla megtalálási valószínűségi sűrűségnek, a fekete a legnagyobb megtalálási valószínűségi sűrűségnek. Láthatjuk, ahogyan a hullámcsomag szétfolynik, úgy egyre szélesebb lesz, de egyre alacsonyabb lesz a csúcsa. Fizikailag ez azt jelenti, hogy a kezdeti, jól lokalizált állapotban a hullámcsomag az \mathbf{r}_0 hely (ami a 4. ábrán az origó) kis környezetében található nagy valószínűséggel, de később már nagyobb térrészre terjed ki. A többszörös rekonstrukciók esetén, ha a rekonstrukció n -szeres, a maximális megtalálási valószínűség $1/n^2$ arányban csökken a kiinduló állapothoz képest.

Természetesen az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldásán alapuló hullámcsomag-dinamikai szimulációkat nemcsak az oktatásban, hanem a kutatásban is eredményesen lehet használni. Ennek szemléltetésére a Web-Schrödinger példái közt szerepel még egy érdekes, a hétköznapi tudományból származó példa, amellyel az 1990-es években tanulmányoztuk a szén nanocsövek alagútmikroszkópos leképezését.

Összegzés

A kvantummechanika megértéséhez nagyon hatékony eszköz a számítógépes szimuláció, amellyel szemléletesen tudunk bemutatni különböző folyamatokat. A Web-Schrödinger egy ilyen szimulációs program, amely a szemléletesség mellett interaktív is. Ezáltal a diákok maguk készíthetnek példákat, modellezhetnek folyamatokat, amelyek segítségével mélyebben megérthetik a kvantummechanika jelenséglátát.

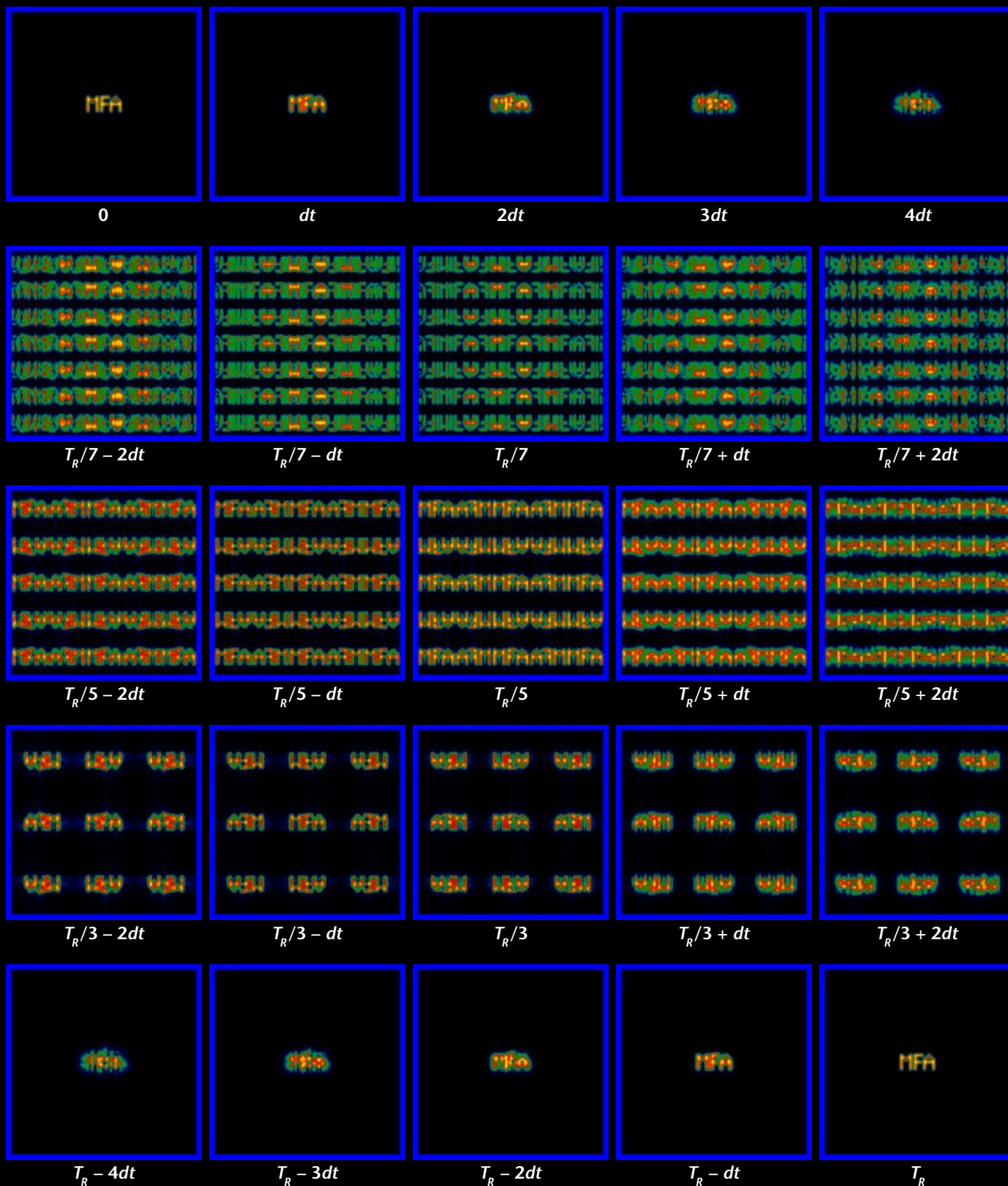
Epilógus

A hullámcsomag-dinamikai szimulációk még a kvantummechanika filozófiai kérdéseit is segítenek megvilágítani – már az egyszerű alagútjelenség példájával. Ugyanis a hullámcsomag, amíg nem éri el a potenciálgátat, egyenletesen halad és közben szétfolynik. A szétfolyás jelensége ellen még talán nem nagyon berzenkedik a klasszikus szemléletünk – annyi történik mindössze, hogy a részecske helyének „bizonytalansága” egyre nagyobb lesz. Ám az alagútjelenség lezajlása utáni végállapotban (2. ábra) azt láthatjuk, hogy a hullámcsomag két különálló részre oszlott, amelyek egyre távolodnak egymástól – azaz immár nem egy, hanem két hely van, amelynek környezetében nagy valószínűséggel megtalálható a részecske. Nevezzük ezeket A (a potenciálfal egyik oldalán) és B (a potenciálfal másik oldalán) helyeknek. Az idő múlásával a két rész-hullámcsomag bármilyen messzire távolodhat egymástól. De – mivel az egyrészecske hullámfüggvény valójában egyetlen tömegpont megtalálási valószínűségi sűrűségét határozza meg – a részecske csak az A hely környezetében, vagy a B hely környezetében lehet, viszont az,

hogy melyik helyen találjuk meg a részecskét, csak akkor derül ki, mikor megmérjük, hogy hol van. Amint megmérjük, hogy például az A oldalon van-e a részecske és azt találjuk, hogy ott van (illetve nincs), ekkor abban a szempillantásban meghatározottá válik, hogy a másik oldalon nincs (illetve van). Az A és B helyeken történő részecske helymeghatározás akkor is antikorrelációt fog mutatni, ha a két mérés között a $t = d/c$ időnél rövidebb idő telik el, ahol d a két hely távolsága és c a vákuumbeli fénysebesség. Ezekről a kérdésekről lásd bővebben [10, 11] Geszti Tamás cikkeit!

Irodalom

1. Gyulai J.: Az anyagtudomány apoteózisa. *Fizikai Szemle* 46/8 (1996) 264.
2. Márk G. I.: A modern fizika alapjai a műszaki menedzser-képzésben – *Fizikai Szemle* 47/9 (1997) 298.
3. D. F. Styer: Common misconceptions regarding quantum mechanics. *American Journal of Physics* 64 (1996) 31–34.
4. E. Schrödinger: Quantisierung als Eigenwertproblem (Zweitere Mitteilung). *Ann. Phys.* 79 (1926) 489.
5. Márk G. I.: Egy hullámcsomag kalandjai az alagútmikroszkópban. *Fizikai Szemle* 61/6 (2006) 190.
6. G. I. Márk, L. P. Biró, J. Gyulai: Simulation of STM images of 3D surfaces and comparison with experimental data: carbon nanotubes. *Phys. Rev. B* 58 (1998) 12645.
7. G. I. Márk, L. P. Biró, P. Lambin: Calculation of axial charge spreading in carbon nanotubes and nanotube Y-junctions during STM measurement. *Phys. Rev. B* 70 (2004) 115423-1.
8. Rajkovits Zs.: Szerkezeti színek az élővilágban. *Fizikai Szemle* 72/4 (2007) 121.
9. D. F. Styer: Quantum revivals versus classical periodicity in the infinite square well. *American Journal of Physics* 69/1 (2001) 56–62.
10. Geszti Tamás: Párolt macska. *Fizikai Szemle* 47/5 (1997) 157.
11. Geszti Tamás: Kvantum és klasszikus határán. *Fizikai Szemle* 58/6 (2008) 209.



A kvantum főnix (quantum revival) jelenség. A $\psi_0(x,y)$ kezdőállapotot az M, F, A betűkből (a Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet rövidítése) alakítottuk ki, a $V(x,y)$ potenciál pedig egy 29 nm széles dobozpotenciál. A részabrákon a $\rho(x,y;t)$ megtalálási valószínűsége sűrűséget ábrázoltuk színskálával (lásd a skálát jobbra), kiválasztott, jellegzetes időpillanatokra, amelyeket a többszörös és teljes újjászületések közelében választottunk. A teljes újjászületés ideje $T_R = 9,3$ ps. Mindegyik részabrárt egyenként normáltuk. A kék négyzet a dobozpotenciált mutatja.

ρ , val.sűrűség
1
0