

## **2. Introduction to Quantum Mechanics of the Electron**

### **a. Particle-wave duality of the electron. Louis de Broglie wave**

In 1923, Louis de Broglie, a French physicist, proposed a hypothesis to explain the theory of the atomic structure. By using a series of substitution de Broglie hypothesizes particles to hold properties of waves. Within a few years, de Broglie's hypothesis was tested by scientists shooting electrons and rays of lights through slits. What scientists discovered was the electron stream acted the same was as light proving de Broglie correct.

#### **Definition of Wave-Particle Duality**

The property of particles behaving as waves and the property of waves behaving as particles as well as waves. Although the duality is not very effective in large matter. The wave characteristic of the electron implicates many of the electron's particle behaviors.

Planck's Hypothesis of the Quantum Theory states that energy is emitted in quanta, little packets of energy, instead of a continuous emission. He stated that energy emitted is related to the frequency of the light emitted. Planck's hypothesis states that a quantum of energy was related to the frequency by his equation  $E=hc$

### **De Broglie Wavelength**

De Broglie derived his equation using well established theories through the following series of substitutions:

1. De Broglie first used Einstein's famous equation relating matter and energy:

$$E = mc^2$$

$E$  = energy,  $m$  = mass,  $c$  = speed of light

2. Using Planck's theory which states every quantum of a wave has a discrete amount of energy given by Planck's equation:

$$E = h\nu$$

$E$  = energy,  $h$  = Planck's constant( $6.62607 \times 10^{-34}$  J s),  $\nu$  = frequency

3. Since de Broglie believes particles and wave have the same traits, the two energies would be the same:

$$mc^2 = h\nu$$

4. Because real particles do not travel at the speed of light, De Broglie substituted  $v$ , velocity, for  $c$ , the speed of light.

$$mv^2 = h\nu$$

5. Through the equation  $\lambda$ , de Broglie substituted  $v/\lambda$  for  $\nu$  and arrived at the final expression that relates wavelength and particle with speed.

$$mv^2 = \frac{h\nu}{\lambda}$$

Hence:

$$\lambda = \frac{h\nu}{mv^2} = \frac{h}{mv}$$

b. Nature of the matter-wave: complex-valued wave-function with probabilistic interpretation of the absolute square.

A  $\Psi(r,t)$  függvény complex értékű, ezáltal fizikai tartalma nincsen, viszont, egyfajta valószínűséget ad meg, így ha kiintegráljuk az abszolútértéknek négyzetét a teljes konfigurációs téren, akkor 1-et kell adnia. Tehát a  $|\Psi(r)|^2 dV$  az megadja, hogy egy elemi  $V$  térfogatba mekkora az adott részecske megtalálási valószínűsége.

2. Annak a valószínűsége, hogy a részecskét a konfigurációs tér egy  $dV$  térfogatában találjuk

$$\Psi\Psi^*dV,$$

amiből pedig következik, hogy

$$\int_{\mathcal{R}} \Psi\Psi^*dV = 1,$$

azaz  $\Psi$  négyzetesen integrálható függvénye a konfigurációs tér változóinak.

### c. The time-dependent Schrödinger equation.

Erwin Schrödinger által megalkotott egyenlet sok választ adott az addigi nyitott kérdésekre a kvantummechanikában. Célja az volt, hogy egy hullámfüggvénytel leírja az elektronat.

Az elektron hullámszerűen (is) viselkedik, és interferenciát mutat (ami szuperpozíciószerű), ezért a hullámfüggvény lineáris. A hullámfüggvény a térbeli változásokat köti össze az időbeli változásokkal.

Adott egy részecske (elektron), ennek van  $m_e$  tömege és  $q_e$  töltése. Továbbá potenciáljával adott egy erőtér, amelyben mozog az elektron. Ekkor a következő egyenletet nevezzük időfüggő Schrödinger-egyenletnek:

$$\mathbf{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}.$$

$\Psi$  az elektron hullámfüggvénye (igazából az egyenlet ismeretlen), és  $\mathbf{H}$  a Hamilton-operátor, ami igazából az elektron összenergiája, tehát:

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + E_{pot},$$

ahol

$$\frac{E_{kin}}{\mathbf{k}^2} = \frac{\hbar^2}{2m}.$$

hiszen

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$$

és

$$\mathbf{p}^2 = (m_0 \mathbf{v})^2. \quad (15)$$

d. The time-independent Schrödinger equation. Eigen-values and eigen-functions.

### 3.7.2. Az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet

A másik egyszerűsített egyenletet pedig átrendezve

$$\mathbf{H}\Psi = E\Psi.$$

Ez tehát az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet. Ehhez az egyenlethez analitikus módon is eljuthatunk, ha egy sima Helmholtz-féle hullámegyenletből indulunk ki, amely a következő alakú:

$$\nabla^2\Psi = -k^2\Psi,$$

ahol  $\nabla^2 = \Delta$ .

A  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  függvényre minden igaz az alábbi összefüggés:

$$\int_V \Psi^*\Psi dV = 1,$$

hiszen a

$$\Psi^*\Psi = |\Psi|^2$$

jelentése valószínűség, és  $V$  pedig az adott konfigurációs tér, így hát annak a valószínűségnek, hogy a konfigurációs térben van az elektron egynek kell lennie.

A  $\Psi$  hullámfüggvény jellemzi a rendszert, és egy komplex értékű függvény, tehát  $\Psi^*$  függvény ennek konjugáltja.

### Eigenvalue Problem:

A subject concerning the time-independent Schrödinger equation we have not yet touched is its interpretation as an eigenvalue equation. Clearly, from its form we see that stationary states  $|\psi\rangle$  are eigenvectors/eigenfunctions of the Hamiltonian  $H$  with eigenvalues  $E$

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \quad (4.10)$$

It implies the exact determination of the energy  $E$ . A stationary state has a precisely defined energy. Calculating the expectation value of the Hamiltonian for a stationary system just gives

$$\langle H \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | E | \psi \rangle = E \langle \psi | \psi \rangle = E. \quad (4.11)$$

Consequently, there is no energy uncertainty  $\Delta E$  for these states

$$\Delta E = \Delta H = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} = \sqrt{E^2 - E^2} = 0. \quad (4.12)$$

Generally eigenvalue equations for linear operators take the form

$$A|\phi\rangle = a|\phi\rangle, \quad (4.13)$$

where  $a$  is an eigenvalue of the linear operator  $A$  with corresponding eigenvector  $|\phi\rangle$ . For hermitian operators there exist important statements about their eigenvalues and eigenfunctions.

#### **Theorem 4.3**

*The eigenvalues of hermitian operators are real and the eigenvectors corresponding to different eigenvalues are orthogonal.*