BEVEZETÉS A KVANTUMMECHANIKÁBA
Piszkozat

Sailer Kornél

Egyetemi előadás

Elméleti Fizikai Tanszék
Debreceni Egyetem
Debrecen
2002-2008.

Tartalomjegyzék

1. A KVANTUMMECHANIKA ELVI ALAPJAI **8**

1.1. Részecske-hullám dualitás 8

1.2. Az alapelvek 10

1.2.1. A lineáris szuperpozíció elve 10

1.2.2. A fizikai mérések valószínűségi kimenetele 12

1.2.3. A határozatlansági elv 18

1.2.4. Kanonikus kvantálás. A megfeleltetési elv 22

2. MOZGÁSEGYENLETEK A KVANTUM-MECHANIKÁBAN **27**

2.1. Az állapotvektor időfüggése 27

2.1.1. A Hamilton-operátor és a Schrödinger-egyenlet 27

2.1.2. Az evolutiós operátor és a Hamilton-operátor 28

2.1.3. A Hamilton-operátor fizikai jelentése 30

2.1.4. A Hamilton-operátor, mint fizikai modell 32

2.2. Fizikai mennyiségek időfüggése 32

2.3. Stacionárius állapotok 33

2.3.1. A stacionárius állapot fogalma és időfüggése 33

2.3.2. Fizikai mennyiségek várható értéke stacionárius állapotban 35

3. ALAPVETŐ FIZIKAI MENNYISÉGEK **36**

3.1. Az állapotok és az operátorok ábrázolása 36

3.1.1. Ismétlés: fizikai mennyiségek 36

3.1.2. Az állapottér vektorainak lineáris ábrázolása 39

3.2. A hullámfüggvény koordináta-reprezentációban 44

3.2.1. Pontrészecske 44

3.3. A helykoordináta és az impulzus 46

3.3.1. A helykoordináta operátorának sajátérték-egyenlete 46

3.3.2. Az impulzus Descartes-komponensének operátora 47

3.3.3. Az impulzus Descartes-komponense operátorának sajátfüggvényei . . 48

3.3.4. Az impulzusoperátor jelentése 51

3.4. A koordináta-hullámfüggvény valószínűségi jelentése 52

3.5. A pályaimpulzusmomentum 54

3.5.1. Pontrészecske pályaimpulzusmomentum-operátorának definíciója . . 54

3.5.2. Pontrészecske pályaimpulzusmomentum-operátorának jelentése . . . 55

3.5.3. Pontrészecske pályaimpulzusmomentumának megmaradása 56
3.5.4. A pályaimpulzusmomentum négyzete 57
3.5.5. A pályaimpulzusmomentum léptető operátorai 58
3.5.6. A pályaimpulzusmomentum operátora gömbi polárkoordináta-rendszerben 58
3.5.7. A pályaimpulzusmomentum operátorának sajátfüggvényei és sajátértékei 60
3.5.8. Forgásszimmetrikus egy-részecskés rendszer stacionárius állapotai . . 65
3.6. A teljes impulzusmomentum és a spin 66
3.6.1. A teljes impulzusmomentum 66
3.6.2. A spin 68
3.6.3. Az impulzusmomentumok összeadása 69
3.6.4. Az elektron spinje. Az $\frac{1}{2}$-spin 72

4. EGYSZERŰ FIZIKAI RENDSZEREK 74
4.1. Spin külső mágneses térben 74
4.1.1. Szabad spin 74
4.1.2. Spin homogén külső mágneses térben 78
4.1.3. Spin T ideig ható, homogén mágneses térben* 81
4.2. Pontrészecske mozgása 84
4.2.1. Belső szabadsági fokok nélküli részecske Hamilton-operátora 84
4.2.2. Nem zérus spinű részecske Hamilton-operátora⋆ 85
4.2.3. Szabad részecske mozgása inerciarendszerben 88
4.2.4. A hullámcsomag szétfolyása 90
4.2.5. Ehrenfest tétele. Newton törvényei? 91
4.2.6. Mikor végez a részecske a klasszikus mechanikaira emlékeztető mozgást?⋆ 93
4.2.7. Dobozba zárt részecske 94
4.2.8. Részecske visszaverődése végtelen potenciálfalon 99
4.2.9. Lineáris harmonikus oszcillátor 101
4.2.10. Alagúteffektus 108
4.2.11. Részecske mozgása centrális potenciálban. Kepler törvényei? 112
4.2.12. Hidrogénatom 117
4.2.13. Részecske szóródása centrális potenciálon. Szórási amplitúdó és hatáskeresztmetszet 128

5. RÉSZECSKERENDSZEREK 139
5.1. Összetett rendszer 140
5.1.1. Független részekből álló rendszer 143
5.1.2. Kölcsönható részekből álló rendszer 146

5.1.3. N-részecskés rendszer koordináta-hullámfüggvénye 147
5.1.4. N-részecskés rendszer koordináta-hullámfüggvényének valószínűségi jelentése* 148
5.1.5. A teljes impulzus 151
5.1.6. Az eredő pályaimpulzusmomentum 154
5.1.7. A pályaimpulzusmomentumok összeadása 156
5.2. A teljes impulzusmomentum 158
5.3. Részecskeazonosság. Fermionok és bozonok 162
5.4. A részecskeazonosság néhány következménye 166
5.5. A lézer* 171
5.6. Atomok Mengyelejev-féle periodusos rendszere 172
5.7. Ideális gázok alacsony hőmérsékleten* 174
5.8. Bose-kondenzátumok interferenciája* 176

6. KÖZELÍTŐ MÓDSZEREK 178
6.1. Stacionárius állapotok meghatározása 178
6.1.1. A Hamilton-operátor diagonalizálása 178
6.1.2. Idő-független, nem elfajult perturbáció-számítás 180
6.1.3. Degenerált perturbáció-számítás 184
6.2. Időfüggő perturbációk 186
6.2.1. Fermi-féle „aranyszabály” 186
6.2.2. Nívószélesség és élettartam, bomlási szélesség és felezési idő 193
6.3. Kváziklasszikus közelítés 193

7. KITEKINTÉS 194
7.1. A Feynman-féle pályaintegrálos kvantálás 194
7.2. Részecskefizika és kvantumtérelmélet. Az alapvető kölcsönhatások 194

A. A kvantummechanika kísérleti alapjai 195
A.1. A kvantummechanika kísérleti előzményei 195
A.1.1. A foton, mint az elektromágneses mező részecskéje 195
A.1.2. Anyaghullámok 204
A.1.3. Az atomok diszkrét gerjesztési energiái 206
A.1.4. Az elektron spinjének felfedezése 209
A.2. A kvantummechanika néhány további kísérleti bizonyítéka* 212

B. Várható érték, szórásnégyzet 218

C. Gauss-integrál* **222**

D. Dirac-delta **225**

1. A KVANTUMMECHANIKA ELVI ALAPJAI

A kvantummechanika célja az anyag mikroszkopikus méretekben, azaz molekuláris, atomi, ill. szubatomi szinten érvényes mozgástörvényeinek megfogalmazása. A kvantummechanika a nem relativisztikus mechanikai mozgás törvényeinek általános érvényű tana. A makroszkopikus testek nem relativisztikus mozgásának Newton-i törvényein alapuló klasszikus mechanika az általános érvényű kvantummechanika határesete.

A kvantummechanikai viselkedés jellegzetességeit általában mikroszkopikus rendszerek esetében figyelhetjük meg. Így pl. a molekulák, atomok, atommagok diszkrét spektrumú elektromágneses sugárzást bocsátanak ki, ami ezen rendszerek gerjesztési energiáinak diszkrét voltára utal. Megfigyelhetjük továbbá, hogy egy részecske (kettős) résen áthaladva elhajlási képet hoz létre, mint ahogy az elektromágneses hullám. A mikroszkopikus rendszerek mellett a sok-részecskés, makroszkopikus rendszerek is mutathatják azonban megfelelő körülmények között a kvantummechanikai viselkedés sajátos jegyeit. Például a gázok, a szilárdtestek nagyon alacsony hőmérsékleten ugyancsak a klasszikus fizikaitól eltérő törvényszerűségeket mutatnak, ami a kvantummechanika alapján értelmezhető. Nevezetesek továbbá az ún. kondenzátumok. Ezek olyan, speciális alapállapotban található makroszkopikus méretű, sok-részecskés fizikai rendszerek, amelyek egyetlen, jól definiált hullámfüggvénnyel írhatók le. Többek között a szupravezetés és a szuperfolyékonyság jelenségei is kondenzátumok létrejöttével kapcsolatosak.

1.1. Részecske-hullám dualitás

Ha az elektronra, a protonra, a fényre, stb. vonatkozó kísérletek tapasztalatait klasszikus fizikai szemlélettel próbáljuk meg megérteni, akkor hamar rá kell jönnünk, hogy ez nem sikerül ellentmondásmentesen. Felfedezhetünk azonban a klasszikus fizikaihoz hasonló viselkedést bizonyos körülmények között. Például **egy kvantummechanikai pontrészecske (pl. az elektron vagy a proton) bizonyos esetekben úgy viselkedik, mint egy klasszikus pontrészecske, más esetekben meg úgy, mint egy klasszikus hullám. A kvantummechanikai részecskének ezt a, kísérleti tapasztalatokból megállapított tulajdonságát nevezzük részecske-hullám dualitásnak.** Az alábbiakban két példán, az elektronnak és **a fény részecskéjének, a fotonnak** a példáján fogom érzékeltetni, hogy mit jelent a részecske-hullám dualitás.

Mielőtt tovább olvassa a jegyzetet, lapozzon a függelékhez, és gondosan olvassa át a kvantummechanika legfontosabb kísérleti előzményeire vonatkozó A.1 fejezetnek a A.1.1, A.1.2 és A.1.3 részeit.

A részecske-hullám dualitásról alkotott képünk szorosan kapcsolatos azzal, hogy klasszikus fizikai fogalmak segítségével akarjuk leírni a kvantummechanikai objektum, pl. az elektron viselkedését. Azért használjuk a klasszikus fizikai mennyiségeket, mert a fizikai mennyiségek mérésére makroszkopikus mérőberendezések állnak csak rendelkezésünkre, amelyek a klasszikus fizika törvényei szerint viselkednek. Csak makroszkopikus mérőberendezéseken tudunk mutatóállást leolvasni, s minden kvantitatív mérést ilyen mutatóállás leolvasására vezetünk vissza.

Az elektron. Vegyük először az elektron példáját. Az elektron se nem klasszikus részecske, se nem klasszikus hullám, hanem kvantummechanikai részecske. Ez abból látszik, hogy az elektron csak bizonyos körülmények között viselkedik ugyanúgy, mint egy klasszikus mechanikai pontrészecske. Nevezetesen, két elektron ütközésében az energia- és az impulzusmegmaradás törvényei ugyanolyan formában érvényesek, mint két klasszikus mechanikai pontrészecske rugalmas ütközése során a klasszikus mechanikában. A kísérleti tapasztalatokból az állapítható meg, hogy **az elektron m_e nyugalmi tömege, $\vec{p}$ im-**

pulzusa és E energiája az Einstein-féle

$$E = \sqrt{m_e^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2} \tag{1.1.1}$$

összefüggésnek tesz eleget, ahol c a fény sebessége vákuumban. **Ez azt jelenti, hogy az elektron jól meghatározott, szigorúan összetartozó energia- és impulzusadagot hordoz.** Az elektron ezen kívül még jól meghatározott elektromos töltést is hordoz, az $|e|$ elemi töltés minusz egyszeresét, $e = -|e|$. Millikan[1] a róla később elnevezett kísérlettel bebizonyította, hogy minden töltött test az elemi töltés egész számú többszörösével rendelkezik, vagyis hogy az elektromos töltés kvantált.

A fent mondottakkal összevetve, az már sokkal meglepőbb, hogy az elektronnal interferenciaképet lehet létrehozni. Bocsássunk át pl. egy köralakú résen, a kör síkjára merőleges, p nagyságú impulzussal rendelkező elektronokat! Mérjük az elektronok becsapódásainak gyakoriságát a hely függvényében a rés mögött, az elektronok impulzusára merőleges síkban elhelyezett ernyőn! Ezt úgy tehetjük meg, hogy az ernyő mentén kicsiny Δf felületű (ablakú) detektorokat helyezünk el, amelyek „megszólalnak", ha az elektron becsapódik. Végezzük a kísérletet úgy, hogy egyszerre mindig csak egy elektron, azaz egy elektronnyi töltés legyen a rendszerben! A tapasztalat az, hogy az ernyőn mindig csak egy detektor „szólal meg" és az elektron teljes töltését, ill. energiáját detektálja. **Az elektron nemcsak jól meghatározott, szigorúan összetartozó energia- és impulzusadagot hordoz, hanem jól meghatározott e töltést is.** A megfelelő energia-, az impulzus- és töltésadag szigorú összetartozását az a tapasztalat bizonyítja, hogy soha nem fordul elő olyan esemény, hogy ugyanazt az elektront egyszerre két detektor is érzékelné, mondjuk úgy, hogy az egyik re, a másik meg $(1-r)e$ töltést mérne, ahol $0 < r < 1$. Ilyen tekintetben az elektron tehát úgy viselkedik, mint egy **oszthatatlan** klasszikus részecske. Már ebben is van eltérés a klasszikus fizikától, mert a klasszikus fizikában a testek részeikre bonthatók, s így sem energiájuk, sem impulzusuk, sem töltésük nem oszthatatlan.

Ha az elektronok azonban klasszikus fizikai részecskék lennének, akkor a kör alakú résen áthaladó elektronok mind a réssel szemben elhelyezkedő, kör alakú „foltba" csapódnának be a felfogó ernyőn, míg az ernyő többi részén nem lenne becsapódás. Ezzel szemben **az egymást követően érkező elektronok becsapódási gyakoriságai a hely függvényében ugyanolyan alakú elhajlási képet rajzolnak ki, mintha klasszikus elektromágneses hullámot bocsátanánk át a résen és mérnénk a rés mögötti ernyőn a fény intenzitását (energiaáramsűrűségének időátlagát) a hely függvényében.** A p impulzusú elektron és a λ hullámhosszúságú klasszikus elektromágneses hullám által létrehozott elhajlási képek akkor egyeznek meg, ha fennáll a

$$\lambda = \frac{h}{p}, \tag{1.1.2}$$

de Broglie-féle összefüggés. A p impulzusú elektron tehát ugyanolyan interferenciaképet hoz létre ebben a kísérletben, mint egy $\lambda = h/p$ hullámhosszúságú klasszikus síkhullám.

A legnagyobb méretű részecskék, amelyekkel sikerült eddig interferencia-kísérletet végrehajtani, porfirin- és fullerénmolekulák. Ezek interferenciáját az arany fémrácsán történő áthaladás után figyelték meg (ld. http://physicsweb.org/article/news/7/9/4 és Phys. Rev. Lett. **91**(2003) 090408).

A foton. Nézzük most a fény kettős viselkedését. Mint már az előbb is beszéltünk róla, a fény interferenciaképet tud létrehozni, pl. résen átbocsátva elhajlási képet kapunk.

[1]Robert A. Millikant (1868-1953, amerikai) 1923-ban fizikai Nobel-díjjal tüntették ki az elemi töltés felfedezéséért és a fotoelektromos effektus vizsgálata terén végzett munkájáért.

Egy másik kísérlet már sokkal meglepőbb. Ha Röntgen-sugárzás esik egy atomi elektronra (Compton-szórás), ami jó közelítéssel annak felel meg, hogy fény ütközik szabad elektronnal, akkor az energia- és az impulzusmegmaradás szempontjából ezt a folyamatot is úgy lehet leírni, mint két klasszikus mechanikai pontrészecske rugalmas ütközését. Ehhez azt kell feltételezni, hogy a klasszikus elektrodinamikai értelemben ω körfrekvenciájú, $\vec{k}$ hullámvektorú ($kc = \omega$) Röntgen-sugárzás (elektromágneses hullám) olyan pontszerű részecskék nyalábja, amelyek egyszerre $E = \hbar\omega$ energiaadagot és $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ impulzusadagot hordoznak. Ezeket a részecskéket nevezzük **fotonoknak.** A foton és az elektron ütközésére az energia- és az impulzusmegmaradás törvénye úgy érvényes, hogy a foton és az elektron energiájának összege, ill. impulzusának vektori összege az ütközés előtt és az ütközés után megegyezik. A Röntgen-sugárzás (ill. az elektromágneses mező) tehát olyan kvantumfizikai objektum, amely bizonyos körülmények között klasszikus mechanikai részecskékhez hasonlóan viselkedik. Mellesleg az is kiderül, hogy a megmaradási törvények elég pontosan teljesülnek akkor is, ha elhanyagoljuk az elektron kötési energiáját az atomban, hiszen $E = \hbar\omega$ a Röntgen-sugárzás esetében $\mathcal{O}(10\text{ keV})$, míg az elektron kötési energiája atomokban $\mathcal{O}(1 - 10\text{ eV})$ nagyságrendű.

Az elektromágneses hullám vákuumbeli terjedésére érvényes $\omega = kc$ összefüggés és a pontrészecskékre érvényes Einstein-féle $E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$ összefüggés alapján **a foton nyugalmi tömege zérusnak adódik:**

$$m_0^2c^4 = E^2 - p^2c^2 = \hbar^2(\omega^2 - k^2c^2) = 0. \tag{1.1.3}$$

A foton impulzusának nagysága és hullámhossza közötti összefüggés $p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$. A fény hullámszerűségének jellemzője, a λ hullámhossz és részecskeszerűségének jellemzője, a foton impulzusának p nagysága között ismét a $p = h/\lambda$ de Broglie-féle összefüggés áll fenn.

Érdemes még azt is elmondani, hogy a fény hullámszerű viselkedése, pl. elhajlása kör alakú résen történt áthaladás után, akkor is mérhető, ha úgy végezzük a kísérletet, hogy a rés és a felfogó ernyő között egyszerre csak egy fotonnyi energia van jelen. A detektorok közül mindig csak egyetlen egy szólal meg, és az mindig a foton teljes $\hbar\omega$ energiáját méri. Az egymást követő fotonok beütési gyakoriságai pedig nagyszámú foton esetén kirajzolják az elhajlási képet a felfogó ernyőn.

1.2. Az alapelvek

Ebben a fejezetben a kvantummechanika alapelveit, a lineáris szuperpozíció elvét és a határozatlansági elvet fogalmazzuk meg. Megismerkedünk továbbá a kvantummechanikai rendszerek viselkedésének azon matematikai leírásmódjával, amely ezeken az elveken alapul. Ebben különösen fontos szerepet kap a kvantummechanikai történések matematikai véletlen kísérletre emlékeztető, azaz valószínűségi jellege és a fizikai mennyiségeknek várható értékként történő értelmezése. A fizikai rendszer kvantummechanikai leírását a megfelelő klasszikus mechanikai modell kvantálásával kapjuk. A Heisenberg-féle kanonikus kvantálást tárgyaljuk, amikor a fizikai rendszert klasszikus mechanikai értelemben jellemző, kanonikusan konjugált változópárokat olyan matematikai objektumokkal, ún. operátorokkal helyettesítjük, amelyek az ún. Heisenberg-féle csererelációkat tesznek eleget.

1.2.1. A lineáris szuperpozíció elve

A fizikai állapot létezése

A kvantummechanika megfogalmazása során abból indulunk ki, hogy **a fizikai rendszereknek jól definiált állapotai vannak.**[2] Jelöljük ψ-vel a fizikai állapotot, amíg nem tisztázzuk, hogy annak milyen matematikai objektum felel meg a matematikai leírásban. Azon, hogy a ψ fizikai állapot jól definiált, azt értjük, hogy véges számú fizikai mennyiség mérésével az állapotról kimerítő, azt egyértelműen jellemző információ szerezhető. Ennek megfelelően a későbbiekben **a ψ fizikai állapotnak megfeleltetett matematikai objektumról azt kell feltegyük, hogy az a fizikai rendszer mikroállapotáról minden információt hordoz, amely mérésekkel arról szerezhető.**

A kvantummechanikai állapotok lineáris szuperpozíciójának elve

A klasszikus fizikában a lineáris hullámjelenségekre általánosan érvényes, hogy a hullámok lineárisan szuperponálhatók. Vegyünk pl. két szinuszos síkhullámot, legyenek ezek $f_1(x,t)$ és $f_2(x,t)$. Ha ez a két hullám találkozik, akkor a kialakuló hullámot $f_1(x,t)+f_2(x,t)$ írja le. Bármelyik hullám amplitudóját tetszőlegesen megváltoztathatjuk, mielőtt azok találkoznak, ezért a klasszikus hullámok lineáris szuperponálhatósága általánosan így fogalmazható: ha f_1 és f_2 klasszikus lineáris hullámok, akkor tetszőleges $a_1f_1+a_2f_2$ lineáris kombinációjuk is klasszikus hullám. Tanultuk, hogy minden periodikus hullám felbontható harmonikus hullámok lineáris szuperpozíciójára, ez a Fourier[3]-felbontás. Az egyes Fourier-módusokat néha egyszerűbb valós hullámmennyiségek helyett komplex hullámmennyiséggel leírni. Ilyenkor a komplex amplitudó fázisa a hullám fáziseltolódását jelenti. A lineáris szuperpozíció elve ilyenkor úgy érvényes, hogy az a_1 és az a_2 komplex lineárkombinációs együtthatók szorozzák az egyébként is komplex f_1 és f_2 hullámmennyiségeket.

A tapasztalati úton felismert részecske-hullám dualitásból a kvantummechanika számára az szűrhető le, hogy az elektron ill. bármilyen kvantummechanikai rendszer bizonyos, a klasszikus hullámokra vonatkozóan is érvényes jegyeket mutat, annak ellenére, hogy nem klasszikus hullám. **Ezért a kvantummechanikában alapelvként fogadjuk el a lineáris szuperpozíció elvét. Ez azt mondja ki, hogy ha ψ_1 és ψ_2 a kvantummechanikai rendszer két lehetséges állapota, akkor $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ is a rendszer egy lehetséges fizikai állapota, ahol c_1 és c_2 tetszőleges számok.**

A fizikai rendszer állapottere

A lineáris szuperpozíció elve alapján azt mondhatjuk, hogy bármely fizikai rendszer állapotai lineáris vektorteret alkotnak. Ez a fizikai rendszer állapottere. A rendszer lehetséges állapotainak vektorok felelnek meg. Bármely két állapot lineáris kombinációja is állapot, az állapotteret jelentő vektortér eleme. Az általánosság csorbítása nélkül feltehetjük, hogy az állapotok vektortere a komplex számok fölött van értelmezve, azaz c_1 és c_2 komplex számok.

A klasszikus hullámok esetében láttuk, hogy azokat le lehet írni komplex amplitúdójú mennyiségekkel és hogy a komplex amplitudó fázisa a hullám fáziseltolódását határozza meg. Ebből gondolhatjuk, hogy a fázisoknak a kvantummechanikában is fontos szerepe lesz, pl. elhajlási képek értelmezése során, gondoljunk a részecske-hullám dualitásra. Ezért kell, hogy általában az állapotok vektorterét a komplex számok felett értelmezzük.

A továbbiakban a rendszer fizikai állapotát megadó állapotvektort $|\psi\rangle$-vel jelöljük és „pszi-ket”-nek olvassuk. Az állapotok lineáris vektorterét $\mathcal{H}$-val

[2]Ebben a jegyzetben csak zárt, azaz környezetükkel kölcsön nem ható fizikai rendszerekről, vagy adott külső térbe helyezett fizikai rendszerekről beszélünk, amelyekre ez a feltevés helytállónak bizonyult.

[3]Jean Baptiste Joseph Fourier (1768-1830, francia) matematikus és fizikus, aki a hővezetés matematikai elméletének kidolgozása közben fejlesztette ki a Fourier-sorok elméletét. A Fourier-transzformáció is a nevét viseli, továbbá az üvegházhatás felfedezőjének tartják.

jelöljük és az állapotok Hilbert[4]-terének nevezzük[5].

1.2.2. A fizikai mérések valószínűségi kimenetele

A fizikai mérés, mint véletlen kísérlet

A fizikai rendszer állapotáról mérések segítségével szerezhetünk ismeretet. A mérés egy dinamikai folyamat, amelynek során a mérőműszer, egy többnyire rendkívül bonyolult, sok részecskét tartalmazó (makroszkopikus méretű!) rendszer hat kölcsön a megfigyelni kívánt mikroszkopikus testtel, a vizsgált fizikai rendszerrel. A kvantummechanika általában nem vállalkozik a mérési folyamat részletes dinamikai leírására. Ehelyett tapasztalatok alapján szerzett ismeretekből dedukálja a mérési folyamat eredményének meghatározó fontosságú jegyeit.

A fizikai mérés a következő lépésekből áll:

[4]David Hilbert (1862-1943, német) matematikus. Kiemelkedőt alkotott az invariánselmélet, az algebrai számelmélet területén, Euklidész után a legnagyobb hatással volt a geometria fejlődésére. Az általa felvetett 23 matematikai probléma és közülük egy-egy megoldása a XX. században jelentős kihatással volt a matematika fejlődésére. Integrálegyenletekről 1909-ben írott munkája indította el a funkcionálanalízis terén a XX. századi kutatásokat, és ugyancsak alapját képezte azon saját kutatásainak, amelyekben a később róla elnevezett Hilbert-tér fogalma megszületett.Még Einstein előtt, tőle függetlenül felfedezte az általános relativitáselmélet helyes téregyenleteit. Érdekes megjegyezni, hogy Heisenberg a kvantummechanikát először mátrixmechanika alakjában, azaz olyan elmélet alakjában fogalmazta meg, ameyben az összefüggéseket mátrixalakban és nem függvényekre vonatkozó differenciálegyenletek alakjában írta fel. Hilbert hívta fel arra a fizikusok figyelmét, hogy keressék a ,,hasznosabb", differenciálegyenletekkel dolgozó matematikai megfogalmazást.

[5]Ez több mint egyszerű elnevezés, a Hilbert-tér jól definiált matematikai fogalom.

E jegyzet kereteit azonban meghaladja a Hilbert-tér pontos matematikai fogalmának tisztázása. A Heisenberg-, Born- és Jordan-féle mátrixmechanika és a Schrödinger-féle hullámmechanika kapcsolatát keresve Neumann János (1903-1957, magyar-amerikai) matematikus dolgozta ki az ,,absztrakt Hilbert-tér" fogalmát, mint segédeszközt a kvantummechanika matematikai alapjainak tisztázásához. Neumann munkássága kiterjedt az axiomatikus halmazelméletre, a matematikai logikára, a mértékelméletre, kidolgozta a kvantummechanika matematikai kereteit, majd a Hilbert-téren ható operátorok algebráit, amelyeket von Neumann-algebráknak is szoktak nevezni. Jelentősen továbbfejlesztette a játékelméletet, behatóan tanulmányozta a hidrodinamikai turbulencia és lökéshullámok nem lineáris egyenleteit. Úttörő munkásságot végzett a számítástudomány területén, megépítette az első elektronikus számítógépet, az automataelmélet terén kifejtett munkásságával a számítástudomány alapjait rakta le.

Az 1932. évi fizikai Nobel-díjat 1933-ban adták át Werner Heisenbergnek (1901-1976, német) a kvantummechanika megalkotásáért, amelynek alkalmazása többek között elvezetett a hidrogén allotróp változatainak a felfedezéséhez.

Max Born (1882-1970, német) fizikus és matematikus jelentős szerepet játszott a kvantummechanika kifejlesztésében. Megosztott fizikai Nobel-díjat kapott 1954-ben a kvantummechanika terén végzett meghatározó jelentőségű kutatásaiért, különös tekintettel a hullámfüggvény statisztikus interpretációjára.

Ernst Pascual Jordan (1902-1980, német) jelentős hozzájárulást tett a kvantummechanikához és a kvantumtérelmélethez. Azon túl, hogy jelentős a hozzájárulása a mátrixmechanika matematikai megfogalmazásához, felfedezte a fermionok kanonikus antikommutátor-relációit, tőle származik az az felismerés hogy a részecskék térkvantumok. Kidolgozta továbbá a fizikai mennyiségek Jordan-algebráját. Ugyancsak kidolgozott egy kozmológiai elméletet, amelyben a természeti állandók változnak a Világegyetem tágulásával.

1. **Az eredetileg $|\psi\rangle$ állapotban levő, vizsgált fizikai rendszert egy mérőberendezéssel hozzuk kölcsönhatásba. Jelöljük f-fel azt a fizikai mennyiséget, amelyet a mérőberendezés mér.**

2. **A kölcsönhatás eredményeként a mérőberendezés valamilyen mutatóállásnak megfelelő állapotba kerül. Ez a mutatóállás szolgáltatja a mért f fizikai mennyiség valamelyik lehetséges f_i értékét.**

3. **A kölcsönhatás eredményeként a vizsgált fizikai rendszer abba a $|\phi_i\rangle$ állapotba kerül, amelyben az f mennyiség értéke pontosan f_i.**

A fentiekkel kapcsolatban fontos a következőket megjegyezni.

1. Lényegi különbség a klasszikus fizikai rendszeren végzett mérés és a kvantummechanikai rendszeren végzett mérés között, hogy amíg a klasszikus fizikai mérésnek pontosan egyféle kimenetele van, addig **a kvantummechanikai rendszeren elvégzett mérésnek általában többféle kimenetele lehetséges.** Tegyük fel, hogy a mérés az f fizikai mennyiség meghatározása. Az f fizikai mennyiségnek a fizikai rendszer egy adott $|\psi\rangle$ állapotában mért értéke általában többféle lehet. A lehetséges f_i értékeket **az f fizikai mennyiség spektrumának** nevezzük. **Az f fizikai mennyiség mindegyik lehetséges f_i értékéhez egyértelműen tartozik a vizsgált fizikai rendszer állapotainak egy $\mathcal{H}_i$ altere.** A különböző f_i lehetséges értékekhez tartozó $\mathcal{H}_i$ alterek szükségszerűen diszjunktak, hiszen ha az egyik lehetséges érték megvalósult, akkor semmelyik másik nem valósult meg, mint a mérési folyamat eredménye. **A kvantummechanika egyik alapfeltevése, hogy a mérés kimenetele valószínűségi jellegű. Másszóval, a mérés egy véletlen kísérlet, amelynek lehetséges f_i kimenetelei meghatározott w_i valószínűségekkel valósulnak meg.** Nyilvánvalóan, valamelyik kimenetelnek meg kell valósulnia, ezért $\sum_i w_i = 1$ kell legyen. Másrészt ez azt is kell jelentse, hogy az egyes f_i értékekhez tartozó állapotok $\mathcal{H}_i$ altereinek egyesítése a teljes $\mathcal{H}$ állapotteret ki kell feszítse: $\mathcal{H} = \sum_i \cup \mathcal{H}_i$.

2. Kézenfekvő elvárás, hogy **minden fizikai mennyiség minden lehetséges értéke valós** legyen.

3. **A mérőberendezéssel való kölcsönhatás megváltoztatja a vizsgált fizikai rendszer állapotát.** Ha elvégzünk a fizikai rendszeren egy mérést, akkor az nem marad ugyanabban az állapotban, mint amiben a mérés elvégzése előtt volt. Elvileg sem lehetséges olyan mérés, amelyik ne változtatná meg a fizikai rendszer állapotát. Tulajdonképpen nincsen ebben semmi meglepő. Amikor egy klasszikus pontrészecske helyzetét határozzuk meg úgy, hogy pillanatfelvételt készítünk róla, akkor fényt szóratunk a részecskén és a szórt fényt detektáljuk. Tudjuk, hogy a fény, amikor kölcsönhat a részecskével és „visszaverődik róla”, akkor impulzust ad át a részecskének, mert a fény mint elektromágneses hullám impulzust hordoz és az impulzusmegmaradás csak a részecske és a fény impulzusának vektori összegére érvényes. Tehát a klasszikus fizikai mérés is megváltoztatja a klasszikus részecske állapotát. A különbség az, hogy ez a beavatkozás a részecske állapotába a klasszikus mechanikában tetszőlegesen kicsivé tehető.

   A kvantummechanikai rendszeren elvégzett mérés a vizsgált rendszer állapotvektorának ugrásszerű, tehát nem folytonos megváltozását eredményezi, amelynek során a vizsgált fizikai rendszer a mérés előtti $|\psi\rangle$ állapotából ugrásszerűen, w_i valószínűséggel az i-edik, lehetséges $|\phi_i\rangle$ állapotába kerül. Az állapotvektornak ezt az ugrásszerű változását **az állapotvektor összeomlásának** szokás nevezni. Az elnevezés értelmére még visszatérünk a későbbiekben. A kvantumfizika egyik

nyitott, ma is kutatott kérdése, hogy hogyan is történik az állapot összeomlása? A másik ilyen nyitott kérdés, hogy hogyan is tud a valójában ugyancsak a kvantumfizika törvényeinek engedelmeskedő mérőberendezés klasszikus fizikai állapotba kerülni, ,,leolvasható mutatóállást" megvalósítani.

A fizikai mennyiség, mint várható érték

Kérdés, milyen matematikai eszközzel lehet a fizikai mennyiségeket úgy kezelni, hogy a fenti kívánalmak a választott matematikai tárgyalásmód keretében teljesüljenek.

1. Az f fizikai mennyiséget mérő eszköz matematikai értelemben azt csinálja, hogy leképezi az állapotok $\mathcal{H}$ terét önmagába. Minden $|\psi\rangle$ állapothoz hozzárendel egy másik állapotvektort. **Az f fizikai mennyiséget tehát egy $\hat{f}$ operátor képviseli. A lineáris szuperpozíció elvével összhangban korlátozzuk a lehetséges fizikai mennyiségeket a lineáris leképezésekre.** Ekkor állapotok lineáris kombinációjának az $\hat{f}$ operátor által előállított képe az egyes állapotok képeinek ugyanolyan együtthatókkal vett lineáris kombinációja:

$$\hat{f}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\hat{f}|\psi_1\rangle + c_2\hat{f}|\psi_2\rangle. \tag{1.2.1}$$

2. A $\mathcal{H}$ állapottéren értelmezett $\hat{f}$ lineáris operátornak vannak f_i sajátértékei és $|\phi_i\rangle$ sajátvektorai:

$$\hat{f}|\phi_i\rangle = f_i|\phi_i\rangle. \tag{1.2.2}$$

A sajátértékeket azonosítjuk az f mennyiség lehetséges f_i értékeivel. A $|\phi_i\rangle$ sajátállapotok azok az állapotok, amelyek valamelyikébe a kezdetben $|\psi\rangle$ állapotú rendszer az f mennyiség mérése után átmegy, vagyis $|\phi_i\rangle$ az az állapot, amelyben az f mennyiség értéke pontosan f_i.

3. Az f mennyiségnek a $|\psi\rangle$ állapotú vizsgált rendszeren elvégzett mérése w_i valószínűséggel adja az f_i eredményt. Most megadjuk azt az utasítást, amelynek segítségével a w_i valószínűségek számolhatók.

   Ehhez először **értelmezzük a vizsgált rendszer $\mathcal{H}$ állapotterében az állapotvektorok skaláris szorzását.** Tetszőleges $|\psi\rangle$ és $|\phi\rangle$ állapotvektorok skaláris szorzatát $\langle\psi|\phi\rangle$ módon jelöljük. A skaláris szorzattól megköveteljük, hogy

   (a) értéke véges komplex szám legyen,

   (b) legyen lineáris a ϕ változóban, azaz bármely $|\phi_1\rangle$ és $|\phi_2\rangle$ állapotvektorok és c_1 és c_2 komplex számok esetén

   $$\langle\psi|c_1\phi_1 + c_2\phi_2\rangle = c_1\langle\psi|\phi_1\rangle + c_2\langle\psi|\phi_2\rangle \tag{1.2.3}$$

   teljesüljön,

   (c) és teljesüljön az alábbi tulajdonság:

   $$\langle\psi|\phi\rangle = [\langle\phi|\psi\rangle]^*, \tag{1.2.4}$$

   (d) és legyen a skalárszorzat pozitív szemidefinit, azaz $\langle\psi|\psi\rangle$ legyen valós és nem negatív,

   $$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0, \tag{1.2.5}$$

   és akkor és csak akkor egyenlő nullával, ha $|\psi\rangle = |0\rangle$ a Hilbert-tér nullvektora.

A (b) és (c) tulajdonságból az következik, hogy a skalárszorzat az első tényezőjében antilineáris,

$$\langle c_1\psi_1 + c_2\psi_2|\phi\rangle = c_1^*\langle\psi_1|\phi\rangle + c_2^*\langle\psi_2|\phi\rangle. \tag{1.2.6}$$

A $\langle\phi_i|\psi\rangle$ skalárszorzattal értelmezzük annak a folyamatnak az amplitudóját, hogy a rendszer a kezdeti $|\psi\rangle$ állapotból a mérőberendezés, azaz a $\hat{f}$ operátor hatására átmegy a $|\phi_i\rangle$ végállapotba, amely az $\hat{f}$ operátor i-edik sajátvektora. Az f_i mérési eredmény bekövetkeztének valószínűségét pedig úgy értelmezzük, mint a megfelelő $\langle\phi_i|\psi\rangle$ átmeneti amplitudó abszolut értékének négyzetét:

$$w_i = |\langle\phi_i|\psi\rangle|^2. \tag{1.2.7}$$

4. Az állapotvektor normáján, $\||\psi\rangle\|$-n az állapotvektor önmagával képezett skalárszorzatának négyzetgyökét értjük: $\||\psi\rangle\| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$, ami mindig nem negatív valós szám és akkor és csak akkor nulla, ha $|\psi\rangle = |0\rangle$ a nullvektor. Utóbbit nem tekintjük fizikai állapotnak. Mivel a fizikai, $|\psi\rangle \neq |0\rangle$ állapotok normája véges és nem zérus, azért **minden fizikai állapotot 1-re normálhatunk.** Máskképpen szólva, azok a fizikai állapotok, amelyek csak a normájukban különböznek, azonos fizikai állapotnak tekinthetők és reprezentálhatók a megfelelő egységnyi normájú állapottal.

5. **Két fizikai állapotot, $|\psi\rangle \neq 0$ és $|\phi\rangle \neq 0$ ortogonálisnak nevezünk, ha a skalárszorzatuk zérus: $\langle\psi|\phi\rangle = 0$.** A Hilbert-tér két alterét ortogonálisnak nevezzük, ha az egyikből vett bármely vektor ortogonális a másikból vett tetszőleges vektorra.

6. A skalárszorzat birtokában megfogalmazhatjuk, mi az a matematikai követelmény, amit az $\hat{f}$ lineáris operátornak ki kell elégítenie ahhoz, hogy meglegyen a két fontos tulajdonsága: (a) minden f_i sajátértéke valós, (b) a sajátértékekhez tartozó $\mathcal{H}_i$ sajátalterek az egész $\mathcal{H}$ állapotteret kifeszítik. Ez akkor következik be, ha az $\hat{f}$ lineáris operátor önadjungált. **Az $\hat{f}$ lineáris operátort önadjungáltnak nevezzük, ha $\hat{f} = \hat{f}^\dagger$, ahol $\hat{f}^\dagger$ az $\hat{f}$ operátor adjungáltja. Az $\hat{f}^\dagger$ operátort az $\hat{f}$ operátornak az adott skalárszorzatra vonatkozó adjungáltjának nevezzük, ha bármely $|\phi\rangle$ és $|\psi\rangle$ állapotvektorok esetén,**

$$\langle\psi|\hat{f}^\dagger|\phi\rangle = [\langle\phi|\hat{f}|\psi\rangle]^* \tag{1.2.8}$$

teljesül. Itt a $\langle\phi|\hat{f}|\psi\rangle$ azt jelöli, hogy a $\hat{f}|\psi\rangle$ vektornak vesszük a skaláris szorzatát a $|\phi\rangle$ vektorral. Az önadjungáltság feltétele tehát úgy is megfogalmazható, hogy tetszőleges $|\psi\rangle$ és $|\phi\rangle$ Hilbert-térből vett vektorok esetén

$$\langle\psi|\hat{f}|\phi\rangle = [\langle\phi|\hat{f}|\psi\rangle]^*. \tag{1.2.9}$$

Be lehet bizonyítani, hogy **önadjungált operátor sajátértékei valósak és – nem elfajult spektrumú operátor esetén – a sajátfüggvényei pedig ortonormált teljes rendszert alkotnak a Hilbert-térben.** Ez a tétel biztosítja a matematikai leírásban a fizikai mennyiségek operátorától elvárt tulajdonságokat.

Elfajult spektrum esetére be lehet bizonyítani azt, hogy **az $\hat{f}$ önadjungált operátor különböző f_i sajátértékeihez tartozó $\mathcal{H}_i$ sajátalterek páronként ortogonálisak és direkt összegük[6] a teljes Hilbert-teret kifeszíti, $\mathcal{H} = \sum_i \oplus\mathcal{H}_i$. Ezért**

[6] A $\mathcal{H}$ lineáris vektortér a $\mathcal{H}_1$ és a $\mathcal{H}_2$ lineáris vektorterek direkt összege, ha bármely $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ egyértelműen felbontható $|\psi\rangle = |\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle$ alakban, ahol $|\phi_i\rangle \in \mathcal{H}_i$ $(i = 1, 2)$.

mindig találhatunk a $\mathcal{H}$ Hilbert-térben olyan ortonormált teljes rendszert, amelynek minden $\mathcal{H}_i$ altérben pontosan annyi eleme van, ahány dimenziós az adott altér. Ha minden $\mathcal{H}_i$ altér egy-dimenziós, akkor a fizikai mennyiség különböző sajátértékeihez tartozó normált sajátvektorok halmaza ortonormált teljes rendszert alkot a $\mathcal{H}$ állapottérben.

Ha az f_i sajátértékhez tartozó $\mathcal{H}_i$ sajátaltér egy-dimenziós, ill. egynél nagyobb dimenziós, akkor rendre azt mondjuk, hogy az f_i sajátérték **nem elfajult**, ill. hogy **elfajult**. Alább – didaktikai szempontból – képleteinket mindig csak arra az esetre fogjuk felírni, amikor az egyes sajátértékek nem alfajultak. Az általánosítás elfajult sajátértékek esetére nem jár elvi nehézséggel.

A $|\phi_i\rangle$ sajátfüggvények **ortonormáltsága** azt jelenti, hogy fenn állnak a

$$\langle\phi_j|\phi_i\rangle = \delta_{i,j} \tag{1.2.10}$$

azonosságok. A sajátfüggvények rendszerének **teljessége** pedig azt jelenti, hogy tetszőleges $|\psi\rangle$ állapot felbontható az f fizikai mennyiség sajátállapotai szerinti lineáris kombináció alakjában,

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i|\phi_i\rangle = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|\psi\rangle. \tag{1.2.11}$$

Itt felhasználtuk, hogy a sajátvektorok ortonormáltsága következtében a lineárkombinációs együtthatók

$$c_i = \langle\phi_i|\psi\rangle. \tag{1.2.12}$$

Ez egyúttal azt jelenti, hogy az egységoperátort felbonthatjuk a $\hat{P}_i = |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$ operátorok összegére,

$$\hat{1} = \sum_i \hat{P}_i = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|. \tag{1.2.13}$$

Ez az **egységfelbontás.** A $\hat{P}_i$ operátorok tetszőleges $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ állapotvektort a $\mathcal{H}_i$ altérre vetítenek,

$$\hat{P}_i|\psi\rangle = |\phi_i\rangle\langle\phi_i|\psi\rangle, \tag{1.2.14}$$

ezért ezeket vetítő, azaz **projektor-operátoroknak** nevezzük. Könnyen belátható, a projektor-operátort ismételten alkalmazva a fenti egyenlet két oldalára, hogy a vetített állapot vetülete önmaga, azaz hogy

$$\hat{P}_i^2 = \hat{P}_i \tag{1.2.15}$$

aznosság áll fenn bármely projektor operátorra.

Az f fizikai mennyiség különböző lehetséges f_i értékeihez tartozó sajátvektorok $\mathcal{H}_i$ alterei páronként ortogonálisak és direkt összegük kiadja a teljes állapotteret.

Ekkor a

$$w_i = |c_i|^2 = |\langle\phi_i|\psi\rangle|^2 \geq 0 \tag{1.2.16}$$

nem negatív valós számok valóban valószínűségeknek tekinthetők, mert összegük bármely normált $|\psi\rangle$ állapotvektor esetén 1-gyel egyenlő, hiszen:

$$1 = \langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{1}|\psi\rangle = \sum_i \langle\psi|\hat{P}_i|\psi\rangle = \sum_i \langle\psi|\phi_i\rangle\langle\phi_i|\psi\rangle = \sum_i |c_i|^2 = \sum_i w_i. \tag{1.2.17}$$

7. Az előző pont alapján visszatérhetünk **az állapotvektor összeomlásának** pontosabb matematikai jelentésére. A mérés elvégzése előtt a vizsgált fizikai rendszer adott $|\psi\rangle$ állapotban van, amely általában az f fizikai mennyiség $\hat{f}$ operátora sajátvektorainak valamilyen lineáris kombinációja,

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle, \tag{1.2.18}$$

ahol $c_i = \langle\phi_i|\psi\rangle$. A mérés következtében ez a lineáris kombináció összeomlik annak egyetlen tagjára,

$$|\psi\rangle \overset{\text{mérés}}{\Longrightarrow} |\phi_i\rangle, \tag{1.2.19}$$

mégpedig $w_i = |c_i|^2 = |\langle\phi_i|\psi\rangle|^2$ valószínűséggel az i-edik tagra.

Ha speciálisan már a mérés előtt a rendszer az f mennyiség operátorának valamelyik $|\phi_{i_0}\rangle$ sajátállapotában volt, azaz $|\psi\rangle = |\phi_{i_0}\rangle$, akkor az f mennyiség mérése nem változtatja meg a vizsgált fizikai rendszer állapotát és bizonyossággal az f_{i_0} mérési eredményt adja, hiszen

$$\langle\phi_{i_0}|\psi\rangle = \langle\phi_{i_0}|\phi_{i_0}\rangle = 1, \qquad \langle\phi_{j\neq i_0}|\psi\rangle = \langle\phi_{j\neq i_0}|\phi_{i_0}\rangle = 0. \tag{1.2.20}$$

8. Végül még azt kell megmondjuk, **mit értünk az $\hat{f}$ operátorral „ábrázolt" fizikai mennyiségnek valamely tetszőleges $|\psi\rangle$ állapotban felvett értékén. Ennek a definíciója:**

$$\bar{f} = \langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle \tag{1.2.21}$$

Speciálisan, ha a rendszer az f mennyiség $|\phi_i\rangle$ sajátállapotában van, akkor

$$\bar{f} = \langle\phi_i|\hat{f}|\phi_i\rangle = f_i\langle\phi_i|\phi_i\rangle = f_i. \tag{1.2.22}$$

Ilyenkor a fizikai mennyiség várható értéke pontosan megegyezik a fizikai mennyiség azon f_i értékével, amelyhez tartozó $|\phi_i\rangle$ sajátállapotban van a rendszer.

Ha a rendszer nincsen az f mennyiségnek megfelelő sajátállapotban, akkor

$$\begin{aligned}\bar{f} = \langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle &= \sum_{i,j}\langle\psi|\phi_i\rangle\langle\phi_i|\hat{f}|\phi_j\rangle\langle\phi_j|\psi\rangle = \sum_{i,j} c_i c_j^* \delta_{ij} f_i \\ &= \sum_i |c_i|^2 f_i.\end{aligned} \tag{1.2.23}$$

Ekkor az f mennyiség $\bar{f}$ értékét úgy kell meghatározni, hogy sokszor megismételjük a mérést az ugyanabban a $|\psi\rangle$ állapotban előkészített rendszeren, és a várhatóérték képzésének szabályai szerint határozzuk meg a fizikai mennyiség értékét ebben az állapotban. Nevezetesen, az egyes lehetséges értékeket az előfordulásuk valószínűségével súlyozva átlagoljuk.

Végül a skalárszorzatra és az operátorokra vonatkozó számolási szabályt ismertetünk. A tetszőleges $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ és $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ vektorok (ψ, ϕ) skalárszorzatát

$$(\psi, \phi) = \langle\psi|\phi\rangle \tag{1.2.24}$$

alakban jelöltük[7], a $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ és $\hat{f}|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ vektorokét pedig

$$(\psi, \hat{f}\phi) = \langle\psi|\hat{f}|\phi\rangle \tag{1.2.26}$$

alakban. Mivel a skalárszorzat a tényezőinek felcserélése esetén a komplex konjugáltjába megy át, azért az $\hat{f}|\psi\rangle$ és $|\phi\rangle$ ilyen sorrendű szorzata:

$$(\hat{f}\psi, \phi) = (\phi, \hat{f}\psi)^* = (\phi, \hat{f}^*\psi) = \langle\phi|\hat{f}^*|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{f}^\dagger|\phi\rangle \tag{1.2.27}$$

alakba írható. Ez azt jelenti, hogy az operátor átvihető a skalárszorzat első tényezőjéről a második tényezőre, de akkor az operátort adjungálni kell.

A számolás egyszerűségét jól szolgálja a $|\ldots\rangle$ ket-, ill. a $\langle\ldots|$ bra-vektorok használata. Formálisan ugyanis a skalárszorzat egy bra- és egy ket-vektor „szorzata”, a $\langle\psi|\hat{f}|\phi\rangle$ kifejezés pedig nem más, mint $\hat{f}$ hat a $|\phi\rangle$ ket-vektorra és az így kapott ket-vektort „szorozza” balról a $\langle\psi|$ bra-vektor. Az f_i sajátértékhez tartozó $\mathcal{H}_i$ sajátalterek projektorai előállíthatók „ket-bra” alakban:

$$\hat{P}_i = |\phi_i\rangle\langle\phi_i|, \tag{1.2.28}$$

az egységoperátor

$$\hat{1} = \sum_i \hat{P}_i = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|, \tag{1.2.29}$$

és az f fizikai mennyiség $\hat{f}$ operátora (ket-vektorokra hat!),

$$\hat{f} = \hat{f}\hat{1} = \sum_i \hat{f}\hat{P}_i = \sum_i (\hat{f}|\phi_i\rangle)\langle\phi_i| = \sum_i f_i|\phi_i\rangle\langle\phi_i| = \sum_i f_i\hat{P}_i. \tag{1.2.30}$$

1.2.3. A határozatlansági elv

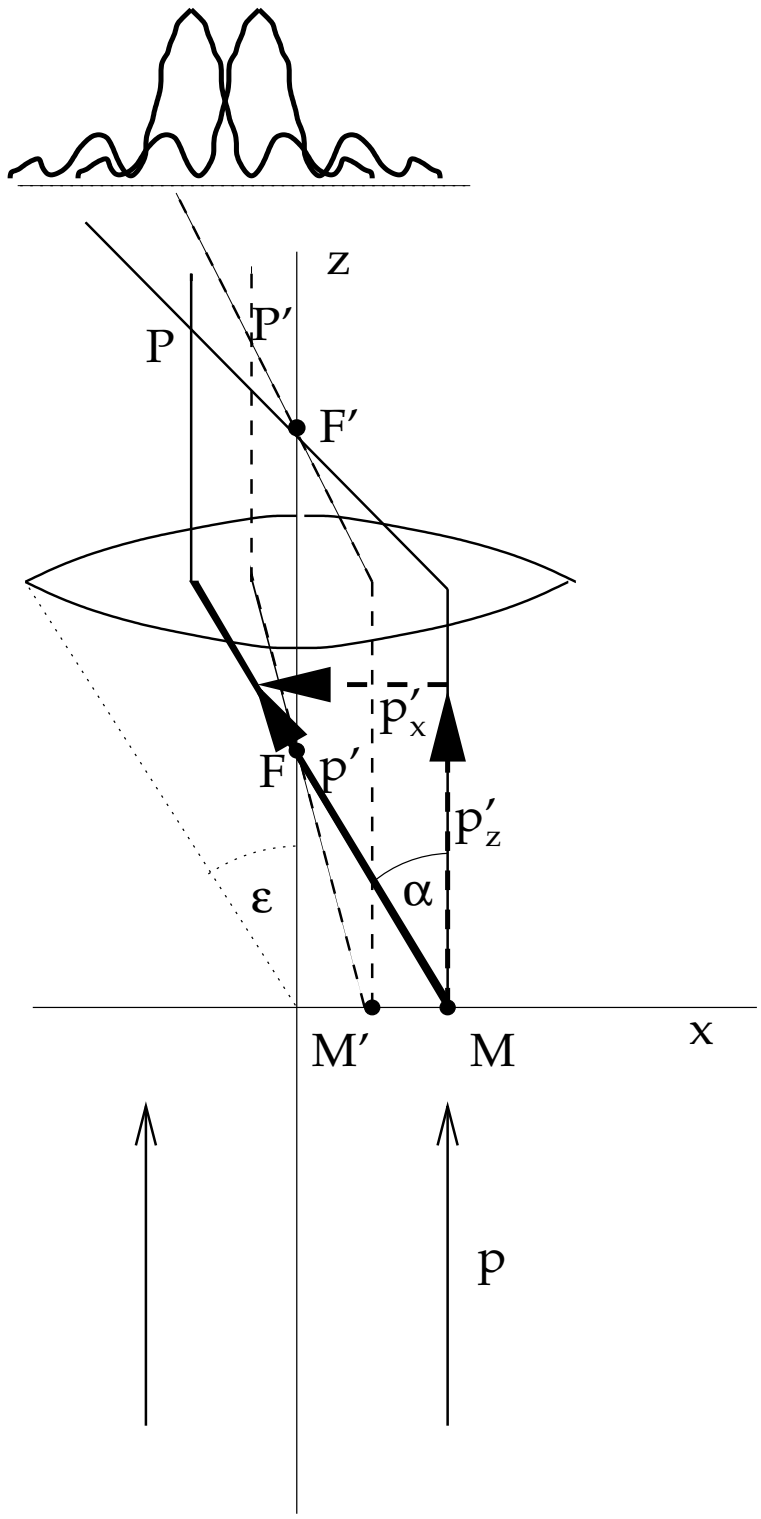
A határozatlansági elv azt mondja, hogy a kvantummechanikai rendszer két olyan jellemzőjét, amelyek klasszikusan egymás kanonikusan konjugált párjai, nem lehet egyidejűleg tetszőleges pontossággal meghatározni.

A legegyszerűbb példa az elektron tartózkodási helye és impulzusa. A klasszikus mechanikában azt tanultuk, hogy a pontrészecske állapotának megadásához a helyének és az impulzusának egyidejű megadása szükséges és elegendő. Nem merült fel semmiféle kétely aziránt, hogy a két mennyiséget tetszőleges pontossággal meg lehet egyidejűleg mérni. Logikai úton könnyű rájönni, hogy ez csak addig lehetséges, amíg klasszikus részecskéről van szó, amely nem képes elhajlási jelenség létrehozására. Az elektron azonban kvantummechanikai objektum, amely elhajlási

[7]Nem tettünk különbséget a (ψ, ϕ) skalárszorzat és annak jelölése között, hogy a $(\psi, \ldots)$ skalárszorzat minden rögzített $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ vektor esetén értelmez egy $\langle\psi|$ („bra-pszí„) lineáris leképezést,

$$\langle\psi| : \forall|\phi\rangle \in \mathcal{H} \mapsto \langle\psi|\phi\rangle = (\psi, \phi) \in C, \tag{1.2.25}$$

amely a Hilbert-tér tetszőleges $|\phi\rangle$ vektorát leképezi a komplex számok C halmazára. A $|\psi\rangle \in \mathcal{H} \mapsto \langle\psi| \in \mathcal{H}^*$ hozzárendelés, ahol $\mathcal{H}*$ a $\mathcal{H}$ Hilbert-tér felett ható lineáris leképezések tere, kölcsönösen egyértelmű.



1. ábra. A Heisenberg-féle mikroszkópos gondolatkísérlet vázlata.

jelenséget tud létrehozni. Alább, a Heisenberg által javasolt mikroszkópos gondolatkísérletet elemezve, arra a következtetésre jutunk, hogy az elektron helyét és impulzusát elvileg sem lehet egyidejűleg tetszőleges pontossággal meghatározni, még akkor sem, ha a mérőműszereink leolvasási hibáját zérusnak feltételezzük.

Ebben a gondolatkísérletben egy kezdetben nyugalomban levő M nyugalmi tömegű, pontszerű tárgyat vizsgálunk elektronmikroszkóppal. Helyezzük a tárgyat a mikroszkóp vízszintes tárgylemezére, legyen a mikroszkóp tengelye függőleges. Bocsássunk a tárgylemezre alulról, merőlegesen $p_z = p$ impulzusú elektronokat. Ezek az M tárgyon szóródva létrehozzák annak képét a képsíkban levő P pontban, amelyet optikai analógia alapján a geometriai optika szabályai szerint könnyen megszerkeszthetünk. (Pl. vesszük az objektív lencse fókuszán átmenő és a z-tengellyel párhuzamosan beeső sugarakhoz tartozó sugármeneteket, amelyek metszéspontja az objektív mśik oldalán a P pont.) Ugyanígy meghatározhatjuk a tárgysíkban kicsit odább elhelyezkedő M' tárgy P' képét is. Ne felejtsük el, az objektívlencse jelen esetben egy speciálisan kialakított elektromágneses mező, a geometriai optikával analó sugármenetek annak felelnek meg, mintha az elektron, mint klasszikus pontrészecske mozogna ezen sugármeneek, mint pályák mentén. A két említett sugármenet az M tárgyon a fókusz irányába szóródott elektron és az M mellett szóródás nélkül elhaladó elektron pályája lenne, ha utóbbi klasszikus pontrészecske lenne. Ha azonban az elektronok ugyanúgy elhajlási jelenséget mutatnak, mint a klasszikus elektromágneses hullám, akkor az M tárgypont képe nem a P pont, hanem egy elhajlási kép fő- és mellékmaximumokkal, amely a képsíkban P-re szimmetrikusan figyelhető meg, és amelynek főmaximuma a P pontban van. Az M közelében található M' tárgypont képe ugyancsak a képsíkban létrejövő, a P' képpontra centrált hasonló elhajlási kép. Az elektronmikroszkóp segítségével az M és M' tárgypontokat akkor és csak akkor tudjuk egymástól megkülönböztetni, ha a képsíkban a két szóbanforgó elhajlási kép P és P' főmaximuma kellően távol esik egymástól. Erre az az elfogadott kritérium, hogy a P körüli elhajlási kép első minimuma helyére vagy ennél távolabbra essen P', azaz az M' ponton, mint akadályon elhajlott hullámok elhajlási képének főmaximuma. Az optikai analógia alapján tudjuk, hogy ez a kritérium a két szomszédos tárgypont közti legkisebb $\overline{MM'} = \delta x$ távolságra

$$\delta x = \frac{\lambda}{2\sin\epsilon}, \tag{1.2.31}$$

ahol λ a hullámhossz és a tárgysík és az optikai tengely (z-tengely) metszéspontjából a tárgylencse 2ϵ szög alatt látszik. Feltettük, hogy a törésmutató a tárgy és az objektív közti közegben $n = 1$. Fénymikroszkóp esetén a fenti összefüggés adja meg a felbontóképességet.

Amennyiben az elektronok ugyanolyan törvényszerűségek alapján hoznak létre elhajlási képet mint a fény, akkor ugyanezt a képletet kell alkalmaznunk az elektronmikroszkóp esetében is. Az elektronok hullámhossza a de Broglie-féle összefüggés

alapján $\lambda = \frac{h}{p}$. Az M tárgy helyét tehát csak

$$\delta x = \frac{\lambda}{2\sin\epsilon} = \frac{h}{2p\sin\epsilon} \tag{1.2.32}$$

pontossággal lehet meghatározni a tárgysíkban.

Mi a helyzet a tárgy impulzusának egyértelmű meghatározottságával. A tárgyon szóródó elektronok impulzust és energiát adnak át a tárgynak. Hogy az elektronmikroszkóp működtetése zavartalan legyen, feltesszük, hogy az elektronok impulzusa csak nagyon kicsit változik meg a szóródás során. Legyen a fókusz irányába szóródó elektronok ütközés utáni impulzusa $\vec{p}\,'$. Ha a szórt elektron impulzusa a mikroszkóp tengelyével α szöget zár be, akkor a szórt elektron $p'_x = p'\sin\alpha \approx p\sin\alpha$ nagyságú vízszintes impulzussal rendelkezik. A vízszintes irányú impulzus megmaradása következtében azonban a kezdetben nyugvó M tárgy azután, hogy az elektron szóródott rajta, $P_x = -p\sin\alpha$ x-irányú impulzusra fog szert tenni. Ahhoz, hogy a szórt elektron hozzájáruljon a képhez, azaz hogy bekerüljön a mikroszkópba, fenn kell állnia az $\alpha \leq \epsilon$ egyenlőtlenségnek. Ezért az M tárgy P_x impulzuskomponenséről annyit tudunk, hogy $|P_x| \leq p\sin\epsilon$, azaz hogy a bizonytalansága:

$$\delta P_x = 2p\sin\epsilon. \tag{1.2.33}$$

Szorozzuk össze az M tárgynak a mérés utáni δx hely- és δP_x impulzusbizonytalanságát:

$$\delta x\ \delta P_x = \frac{h}{2p\sin\epsilon}\ 2p\sin\epsilon = h. \tag{1.2.34}$$

A Heisenberg-féle határozatlansági reláció azt mondja ki, hogy az egymáshoz kanonikusan konjugált mennyiségek bizonytalanságainak szorzatára létezik egy a Planck-állandóval arányos, annak a nagyságrendjébe eső alsó korlát:

$$\delta x\ \delta P_x > \mathcal{O}(h). \tag{1.2.35}$$

A határozatlansági elv egyik fontos következménye, hogy nem létezik az elektron sebessége abban az értelemben, ahogyan azt a klasszikus mechanikában szoktuk értelmezni. Tegyük fel, hogy egymást követő τ időközönként leolvassuk az elektron helyzetét. Minél kisebbre választjuk a τ időtartam hosszát, annál pontosabban nyomon fogjuk követni az elektron helyét. Ez azonban azt fogja jelenteni, hogy egyre nagyobbnak fogjuk találni az impulzusának bizonytalanságát. Ezért a $\vec{v} = \vec{p}/m$ képlet alapján kapott sebesség egyre bizonytalanabb lesz. Fordítva, ha egyre kisebb időtartamonként próbáljuk meg leolvasni az elektron impulzusát, egyre nagyobbnak fogjuk találni a határozatlansági elv értelmében a helyének bizonytalanságát. Se így, se úgy nem tudunk az elektron mozgásához egy differenciálható pályát rendelni,

amelynek érintője lenne a sebesség. A pálya és a sebesség klasszikus mechanikai fogalmai nem alkalmazhatók az elektronra. Helyettük a

$$\Delta p_i \; \Delta x_i > \mathcal{O}(h), \tag{1.2.36}$$

egyenlőtlenségek érvényesek a koordináták és a megfelelő impulzuskomponensek bizonytalanságaira.

Később látni fogjuk, hogyan valósul meg ez az elv az elmélet matematikai keretei között. Akkor azt is meg fogjuk tanulni, hogyan kell az egyenlőtlenség jobb oldalán álló alsó korlátot esetenként pontosan meghatározni.

1.2.4. Kanonikus kvantálás. A megfeleltetési elv

A kvantummechanikai rendszer ,,hullámszerű" viselkedése azt sugallja, hogy érvényes a kvantummechanikában a lineáris szuperpozíció elve, ill. hogy a fizikai rendszer állapotai $\mathcal{H}$ lineáris vektorteret alkotnak. A fizikai mérések kimenetelének valószínűségi értelmezéséhez a Az állapottéren skalárszorzatot vezettünk be, a fizikai mennyiségeknek pedig erre a skalárszorzatra nézve önadjungált operátorokat feleltettünk meg. Adott állapotú rendszeren mérve egy fizikai mennyiséget, annak értékére különböző lehetséges értékeket kaphatunk, mégpedig mindegyiket jól meghatározott valószínűséggel. Ezeknek a valószínűségeknek a kiszámítására a skalárszorzat segítségével adtunk utasítást. Adott állapotban a fizikai mennyiség értékén annak várható értékét értjük, azaz a különböző lehetséges mérési eredményeknek a bekövetkezésük valószínűségével súlyozott átlagát. Az eddigiekből egyedül arra nem kaptunk választ, hogy az egyes fizikai mennyiségeknek milyen operátorok felelnek meg. Most erre a kérdésre keressük a választ. Pontosabban, azt a szabályt keressük, amelynek alapján remélhetjük, hogy az egyes fizikai mennyiségek operátorainak az explicit alakját is megtaláljuk.

A Heisenberg által megfogalmazott határozatlansági elv azt mondja, hogy a fizikai rendszer részecskéinek helyét jellemző Descartes-koordinátáknak és a hozzájuk kanonikusan konjugált impulzuskomponenseknek speciális viszonyban kell egymással lenniük. Nem lehet az értékük ugyanabban az állapotban egyszerre jól meghatározott. **Akkor mondjuk, hogy egy adott állapotban az f fizikai mennyiség értéke jól meghatározott, ha a fizikai mennyiség mérése ebben az állapotban bizonyosan (1 valószínűséggel) a lehetséges f_i értékek valamelyikét eredményezi. Ez akkor és csak akkor van így, ha a fizikai rendszer állapota az f fizikai mennyiség $\hat{f}$ operátorának i-edik sajátalterének ($\mathcal{H}_i$) állapotvektora, ill. nem elfajult f_i sajátérték esetén a megfelelő $|\phi_i\rangle$ sajátvektor.**

Ha két fizikai mennyiség, f és g értéke jól meghatározott egy adott állapotban, akkor ez azt kell jelentse, hogy a megfelelő $\hat{f}$ és $\hat{g}$ operátoroknak van közös sajátfüggvényrendszere és a fizikai rendszer ezen közös sajátállapotok valamelyikében található. A közös sajátfüggvényrendszer létezésének

szükséges és elégséges matematikai feltétele, hogy a két operátor felcserélhető legyen, azaz

$$[\hat{f}, \hat{g}] \equiv \hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} = 0 \tag{1.2.37}$$

legyen. A $[\hat{f}, \hat{g}]$ szimbólumot az $\hat{f}$ és $\hat{g}$ operátorok kommutátorának nevezzük.

Ha két fizikai mennyiség operátorainak kommutátora nem zérus, akkor azt mondjuk, hogy a két fizikai mennyiség nem mérhető egyidejűleg. Ilyenkor nincsen olyan állapota a fizikai rendszernek, amelyben mindkét mennyiség jól definiált értékkel rendelkezne.

A Heisenberg-féle határozatlansági elv azt fogalmazza meg, hogy az x Descartes-koordináta és a hozzá kanonikusan konjugált p_x impulzus nem lehet egyszerre jól definiált értékű. Ez azt kell jelentse, hogy a fizikai rendszer semmiképpen sem lehet az $\hat{x}$ és a $\hat{p}_x$ operátor közös sajátállapotában, azaz hogy az egymáshoz kanonikusan konjugált mennyiségek operátorainak nem lehet közös sajátfüggvényrendszere. Ez azt jelenti, hogy a $[\hat{x}, \hat{p}_x]$ kommutátor nem zérus:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] \neq 0 \tag{1.2.38}$$

A Heisenberg-féle határozatlansági elv teljesüléséhez ezt tehát fel kell tegyük. Ez azonban még nem elég. A határozatlansági elv nemcsak azt állítja, hogy a kanonikusan konjugált mennyiségek egyidejűleg nem mérhetők, hanem azt is, hogy a szórásaik szorzata a fizikai rendszer bármely állapotában alulról korlátos. **Az f fizikai mennyiség szórásának megadhatjuk a pontos valószínűségi definicióját:**

$$\Delta f = \left[\langle\psi| \left(\hat{f} - \langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle \right)^2 |\psi\rangle \right]^{\frac{1}{2}}. \tag{1.2.39}$$

Ezt kell tekintsük a f mennyiség mért értéke bizonytalanságának az adott $|\psi\rangle$ állapotban. A Heisenberg-féle határozatlansági elv pl. megköveteli, hogy a Descartes-koordináta és a hozzá kanonikusan konjugált impulzus bizonytalanságának szorzatára a

$$\Delta x \; \Delta p_x \gtrsim \hbar \tag{1.2.40}$$

egyenlőtlenség teljesüljön. Ez az úgynevezett **Heisenberg-féle határozatlansági reláció**.

Heisenbergtől származik az a felismerés, hogy a $\Delta x \; \Delta p_x \gtrsim \hbar$ határozatlansági reláció fennállását úgy lehet matematikailag biztosítani, ha **a fizikai mennyiségeknek úgy feleltetünk meg operátorokat, hogy a kanonikusan konjugált helyzetvektor- és impulzuskomponensekre a**

$$\begin{aligned} &[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar, \quad [\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar, \quad [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar, \\ &[\hat{x}, \hat{y}] = [\hat{x}, \hat{z}] = [\hat{y}, \hat{z}] = 0, \\ &[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = [\hat{p}_x, \hat{p}_z] = [\hat{p}_y, \hat{p}_z] = 0 \end{aligned} \tag{1.2.41}$$

Heisenberg-féle csererelációk teljesülését írjuk elő. Ha a klasszikus mechanika fizikai mennyiségeit a Heisenberg-féle csererelációk megkövetelésével tesszük operátorokká, akkor azt mondjuk, hogy a klasszikus mechanikai elmélet kanonikus kvantálásával kapjuk meg a kvantummechanikai elméletet.

Könnyen beláthatjuk, hogy a fenti csererelációk valóban a Heisenberg-féle határozatlansági relációt eredményezik. Az egyszerűség kedvéért nézzük az egy-dimenziós mozgás esetét. Képezzük tetszőleges ξ valós szám segítségével a

$$\left(\xi\hat{x} + \frac{i}{\hbar}\hat{p}_x\right)|\psi\rangle \tag{1.2.42}$$

állapotot, ill. ennek normanégyzetét, amelyről tudjuk, hogy a skalárszorzat feltételezett tulajdonságai miatt nem szabad negatívnak lennie:

$$\begin{aligned} 0 \leq I(\xi) \equiv \left\| \left(\xi\hat{x} + \frac{i}{\hbar}\hat{p}_x\right)|\psi\rangle \right\|^2 &= \langle\psi|\left(\xi\hat{x} - \frac{i}{\hbar}\hat{p}_x\right)\left(\xi\hat{x} + \frac{i}{\hbar}\hat{p}_x\right)|\psi\rangle \\ = \xi^2\langle\psi|\hat{x}^2|\psi\rangle + \xi\frac{i}{\hbar}\langle\psi|[\hat{x},\hat{p}_x]|\psi\rangle &+ \frac{1}{\hbar^2}\langle\psi|\hat{p}_x^2|\psi\rangle. \end{aligned} \tag{1.2.43}$$

Ha abba az inerciarendszerbe ülünk bele, amelyben a részecske impulzusának várható értéke éppen nulla és a koordinátarendszer origóját úgy választjuk meg, hogy a részecske helykoordinátájának várható értéke is éppen nulla legyen, akkor

$$\langle\psi|\hat{x}^2|\psi\rangle = (\Delta x)^2, \qquad \langle\psi|\hat{p}_x^2|\psi\rangle = (\Delta p_x)^2. \tag{1.2.44}$$

Az egyenlőtlenség tehát

$$0 \leq \xi^2(\Delta x)^2 - \xi + \frac{1}{\hbar^2}(\Delta p_x)^2 \tag{1.2.45}$$

alakot ölt tetszőleges ξ esetén. Itt felhasználtuk a Heisenberg-féle csererelációt: $[\hat{x},\hat{p}_x] = i\hbar$. Ahhoz, hogy az egyenlőtlenség fennálljon tetszőleges ξ esetén, az szükséges és elegendő, hogy

$$1 - 4(\Delta x)^2\frac{1}{\hbar^2}(\Delta p_x)^2 \leq 0 \tag{1.2.46}$$

egyenlőtlenség teljesüljön, ahonnan

$$(\Delta x)(\Delta p_x) \geq \frac{1}{2}\hbar \tag{1.2.47}$$

alakban megkapjuk a határozatlansági relációt. Ezt akartuk belátni.

Mivel tetszőleges klasszikus fizikai mennyiség a koordináták és az impulzusok kifejezése, $f = f(\vec{r},\vec{p})$, ezért a fenti utasítás azt is megmondja, hogy tetszőleges más fizikai mennyiséghez milyen operátort, $\hat{f} = f(\hat{\vec{r}},\hat{\vec{p}})$, kell hozzárendelni. (Több, egymással fel nem cserélhető operátor szorzatának egyértelműsítéséről gondoskodni kell, de ezzel mi most nem foglalkozunk.)

Amennyiben a fizikai rendszer nem egyetlen pontrészecskéből áll, hanem egynél több részecskét tartalmaz, akkor minden egyes részecske Descartes-koordinátáira és

a hozzájuk kanonikusan konjugált impulzuskomponensekre ugyanilyen alakú csererelációkat írunk elő és feltesszük, hogy a különböző részecskék operátorai egymással kommutálnak. Jelölje az $a, b, \ldots = 1, 2, \ldots, N$ részecske-index, hogy az N-részecskés rendszer hányadik részecskéjéről van szó, továbbá az $j, k, \ldots = 1, 2, 3$ index a vektoroperátorok megfelelő Descartes-komponenseit, akkor az $\hat{\vec{r}}_a$ helyzetvektor- és a $\hat{\vec{p}}_a$ impulzus-operátorokra vonatkozó kanonikus csererelációk az alábbiak:

$$[\hat{x}_{a,j}, \hat{p}_{b,k}] = i\hbar\delta_{a,b}\delta_{j,k}. \tag{1.2.48}$$

A klasszikus mechanika $f(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \ldots, \vec{p}_N)$ fizikai mennyiségeinek megfelelő kvantummechanikai $\hat{f}$ operátort az $\hat{f} = f(\hat{\vec{r}}_1, \ldots, \hat{\vec{r}}_N, \hat{\vec{p}}_1, \ldots, \hat{\vec{p}}_N)$ megfeleltetés adja[8].

Azt szoktuk mondani, hogy a Heisenberg-féle egyidejű csererelációk előírása az úgynevezett első kvantálás. Az „első" megjelölés történeti hagyomány, de megtévesztő, mert egy klasszikus elméletet csak egyszer lehet kvantálni.

Ha az állapottér vektorait meghatározott módon ábrázoljuk függvényekkel, akkor a fizikai mennyiségek operátorait úgy kell megválasztani, hogy a Heisenberg-féle csererelációk kielégüljenek.

A Heisenberg-féle csererelációk tulajdonképpen a megfelelő klasszikus mechanikai rendszerben érvényes, egyidejű Poisson[9]-zárójelek,

$$\begin{aligned} &\{x, p_x\}_P = \{y, p_y\}_P = \{z, p_z\}_P = 1, \\ &\{x, y\}_P = \{x, z\}_P = \{y, z\}_P = 0, \qquad \{p_x, p_y\}_P = \{p_x, p_z\}_P = \{p_y, p_z\}_P = 0 \end{aligned} \tag{1.2.49}$$

kvantummechanikai megfelelői, ahol a megfeleltetés a klasszikus mechanikai rendszer és a kvantummechanikai rendszer között az alábbi táblázatban foglalható össze.

[8] Az f fizikai mennyiség változóinak analitikus függvénye a klasszikus mechanikában. A megfelelő $\hat{f}$ operátor egyértelműsítése a klasszikus Taylor-sor koordináta- és impulzus-komponenseket szorzatalakban tartalmazó tagjainak egyértelmű operátorosítását követeli meg, amiről az ún. Weyl-féle rendezéssel lehet gondoskodni. Ennek részleteivel itt nem foglalkozunk.

Hermann Klaus Hugo Weyl (1885-1955, német) matematikus, akinek munkássága különösen jelentős kihatással volt az elméleti fizika és a számelmélet fejlődésére. A XX. szd. egyik legkiemelkedőbb matematikusa volt. Számos munkájában foglalkozott a térrel, az idővel, az anyaggal, a filozófiával, a logikával, a szimmetriákkal és a matematika történetével. Az elsők egyike volt, aki kigondolta az általános relativitáselmélet és az elektromágnesség törvényeinek egy lehetséges kombinálását.

[9] Siméon Denis Poisson (1781-1840, francia) matematikus és fizikus, aki szerteágazó tevékenységet fejtett ki a matematika, a matematikai fizika és az elméleti mechanika területén. Nevéhez fűződnek a XIX. szd. legjelentősebb valószínűségszámítási eredményei (pl. a Poisson-eloszlás). A Newton-i gravitációs elmélet és az elektrosztatika alapegyenlete az általa felállított Poisson-egyenlet. A mechanika Poisson-zárójeles megfogalmazása ugyancsak tőle származik, és egyik kiindulópontja volt a kvantummechanika kanonikus kvantáláson alapuló, Heisenberg-féle megfogalmazásának.

Klasszikus rendszer	$\longrightarrow$	Kvantummechanikai rendszer
x	$\rightarrow$	$\hat{x}$
p_x	$\rightarrow$	$\hat{p}_x$
$\{.,.\}_P$	$\rightarrow$	$\frac{1}{ih}[.,.]$
$f(x,p_x)$	$\rightarrow$	$\hat{f} = f(\hat{x},\hat{p}_x)$

Ez fejezi ki azt **a megfeleltetési elvet, hogy minden klasszikus fizikai rendszernek megfelel egy kvantummechanikai rendszer.**

Végezetül még megjegyezzük, hogy léteznek olyan fizikai mennyiségek, amelyeknek nincsen klasszikus mechanikai megfelelőjük, továbbá vannak olyan kvantummechanikai rendszerek, amelyeknek ugyancsak nincsen klasszikus mechanikai megfelelőjük.

2. MOZGÁSEGYENLETEK A KVANTUM-MECHANIKÁBAN

Ebben a fejezetben az állapotvektor és a fizikai mennyiségek időfüggését meghatározó mozgásegyenleteket keressük meg. Megmutatjuk, hogy a fizikai rendszer időbeli változását a rendszer Hamilton-operátora egyértelműen meghatározza.

2.1. Az állapotvektor időfüggése

Megmutatjuk, hogy a normált állapotvektor időbeli változását egy időtől függő unitér operátorral, az úgynevezett evoluciós operátorral lehet leírni. Az evoluciós operátor is és az időtől függő állapotvektor is eleget tesz egy-egy mozgásegyenletnek, amelyek az úgynevezett Schrödinger[10]-egyenletnek különböző alakjai. Megismerkedünk a Hamilton-operátorral[11], amely meghatározza az evoluciós operátor és az állapotvektor időbeli változását.

2.1.1. A Hamilton-operátor és a Schrödinger-egyenlet

Mivel a $|\psi(t)\rangle$ állapotvektor – értelmezésének megfelelően – a fizikai rendszer állapotára vonatkozó minden fizikai információt tartalmaz, azért azt az információt is tartalmaznia kell, hogy milyen lesz az állapot infinitezimális δt idővel később. Ez azt jelenti, hogy léteznie kell egy $\hat{H}(t)$, általában az időtől is függő operátornak, amelynek segítségével írhatjuk, hogy az állapotvektor δt idő alatti megváltozása:

$$|\psi(t+\delta t)\rangle - |\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{2.1.1}$$

ha $\delta t \to 0$. A megváltozást jelentő operátor előtti szorzótényezőt a konvenciónak megfelelően választottuk. A lineáris szuperpozíció elve megköveteli, hogy tetszőleges két állapot lineárkombinációjának infinitezimális megváltozása az összetevő állapotok infinitezimális megváltozásainak ugyanolyan együtthatós lineáris kombinációja le-

[10] Az 1933. évi fizikai Nobel-díjat egyenlő arányban megosztva ítélték oda Erwin Schrödingernek (1887-1961, osztrák) és Paul Adrien Maurice Diracnak (1902-1984, angol) az atomi elmélet, a kvantummechanika új produktív alakjainak felfedezéséért.

[11] Az elnevezés onnan származik, hogy a klasszikus mechanikában az időbeli fejlődést meghatározó Hamilton-függvény kvantummechanikai megfelelőjéről van szó. A Hamilton-függvény és a Hamilton-operátor is Sir William Rowan Hamilton (1805-1865, angol) fizikus nevét viseli, akinek érdeme többek között, hogy kidolgozta a klasszikus mechanikának a kvantummechanikai általánosításra később különösen alkalmasnak bizonyult megfogalmazását, amelyet ma Hamilton-i mechanikának nevezünk. Ugyancsak ő vezette be a hatásfunkcionál fogalmát és – lényegében a legkisebb hatás elve alapján – módszert adott a mechanika és a geometriai optika jelenségeinek egységes tárgyalására.

gyen. Ezért a $\hat{H}(t)$ operátornak lineáris operátornak kell lennie. A (2.1.1) egyenletnek megfelelően az

$$i\hbar\partial_t|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \tag{2.1.2}$$

egyenletnek kell fennállnia az időtől függő állapotvektorra nézve. **Ez az állapotvektorra vonatkozó Schrödinger-egyenlet, a benne szereplő $\hat{H}(t)$ operátort Hamilton-operátornak nevezzük** [12]. A következő alfejezetben be fogjuk látni, hogy **a Hamilton-operátor nemcsak lineáris, hanem önadjungált operátor is.**

2.1.2. Az evoluciós operátor és a Hamilton-operátor

A kvantummechanikai rendszer állapotvektorának időbeli változása matematikai értelemben nem más, mint az állapotvektorok terének önmagára történő folytonos leképezése, amely leképezésnek 2 paramétere van, a kezdeti t_0 időpillanat és az a t pillanat, amelyben keressük az állapotvektort. Jelölje $\hat{U}(t,t_0)$ azt az operátort, ami megvalósítja ezt a leképezést, azaz ami leírja az állapotvektor időbeli fejlődését, evolucióját:

$$\hat{U}(t,t_0) : |\psi(t_0)\rangle \mapsto |\psi(t)\rangle \equiv \hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle, \tag{2.1.6}$$

ahol $|\psi(t_0)\rangle$ tetszőleges kezdeti állapot. Az $\hat{U}(t,t_0)$ operátort **evoluciós operátornak** nevezzük. Felhasználva a Schrödinger-egyenlet (2.1.1) alakját, infinitezimális δt időtartam esetén írhatjuk, hogy

$$|\psi(t+\delta t)\rangle = \hat{U}(t+\delta t,t_0)|\psi(t_0)\rangle = \left(\hat{1}-\frac{i\delta t}{\hbar}\hat{H}(t)\right)|\psi(t)\rangle = \left(\hat{1}-\frac{i\delta t}{\hbar}\hat{H}(t)\right)\hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle, \tag{2.1.7}$$

azaz az állapotvektort infinitezimális δt idő alatt fejlesztő $\delta\hat{U}$ operátor

$$\delta\hat{U} \equiv \hat{U}(t+\delta t,t_0) - \hat{U}(t,t_0) = -\frac{i\delta t}{\hbar}\hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0) \tag{2.1.8}$$

összefüggésben áll a Hamilton-operátorral, és csak infinitezimálisan különbözik az $\hat{1}$ egységoperátortól. A fenti összefüggést úgy is felírhatjuk, mint az evolúciós operátorra vonatkozó

$$i\hbar\partial_t\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0) \tag{2.1.9}$$

[12] Az állapotvektor normájának az időtől függetlenül 1-gyel kell egyenlőnek maradnia. A $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1$ skalárszorzatot deriválva az idő szerint, azt kapjuk, hogy

$$\Big(i\hbar\partial_t\langle\psi(t)|\Big)|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\Big(i\hbar\partial_t|\psi(t)\rangle\Big) = 0, \tag{2.1.3}$$

ill. hogy

$$\Big(i\hbar\partial_t\langle\psi(t)|\Big)|\psi(t)\rangle = -\langle\psi(t)|\Big(i\hbar\partial_t|\psi(t)\rangle\Big) = -\langle\psi(t)|\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle, \tag{2.1.4}$$

azaz

$$i\hbar\partial_t\langle\psi(t)| = -\langle\psi(t)|\hat{H} \tag{2.1.5}$$

egyenlet áll fenn formálisan a $\langle\psi(t)|$ „bra”-vektorra.

differenciálegyenletet[13], amelyet – értelemszerűen – az

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1} \tag{2.1.11}$$

kezdőfeltétellel kell megoldani, hogy megkapjuk az evoluciós operátort.

Ha a Hamilton-operátor független az időtől, akkor a megoldás különösen egyszerű alakú:

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}. \tag{2.1.12}$$

Látjuk, hogy **a Hamilton-operátor egyértelműen meghatározza az evoluciós operátort.** A Hamilton-operátor akkor is egyértelműen meghatározza az evoluciós operátort, ha függ az időtől[14]. Mivel a Hamilton-operátor lineáris operátor, azért az (2.1.10) operátor-egyenlet integrálásával kapott **evoluciós operátor is lineáris operátor**.

Az állapotvektort időben fejlesztő $\hat{U}(t, t_0)$ operátornak azonban nemcsak lineárisnak kell lennie, hanem meg kell őriznie az állapotvektor normáját is. **Az olyan operátort, amely megőrzi az állapotvektorok skaláris szorzatát (és így normáját is) definíció szerint unitér operátornak nevezzük. Az evoluciós operátor tehát unitér operátor. Meg lehet mutatni, hogy az $\hat{U}$ operátor akkor és csak akkor unitér, ha létezik az inverze és az megegyezik az adjungáltjával: $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{\dagger}$.**[15]

[13] A „bra”-vektorra vonatkozó Schrödinger-egyenletből hasonlóan kapjuk az evoluciós operátor t_0-függésére az alábbi differenciálegyenletet:

$$i\hbar\partial_{t_0}\hat{U}(t, t_0) = -\hat{U}(t, t_0)\hat{H}(t_0). \tag{2.1.10}$$

[14] Ha a Hamilton-operátor függ az időtől, akkor

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{T}e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}(\tau)d\tau} \equiv \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \cdots \int_{t_0}^{t} dt_n \hat{T}\Big(\hat{H}(t_1)\cdots\hat{H}(t_n)\Big), \tag{2.1.13}$$

ahol $\hat{T}$ az időrendezés operátora, amely időtől függő operátorok szorzatára úgy hat, hogy jobbról balra haladva a tényező operátorokat monoton növekvő időargumentumuk szerint rendezi.

[15] Az $\hat{U}$ operátor inverze akkor és csak akkor létezik, ha $\hat{U}$ értelmezési tartománya és „értékkészlete” megegyezik és az operátor kölcsönösen egyértelmű leképezést valósít meg; ekkor $\hat{U}\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{-1}\hat{U} = \hat{1}$, ahol $\hat{1}$ az értelmezési tartományon azonos leképezést megvalósító egységoperátor. Az unitaritás definíciója értelmében tetszőleges, normált, kezdeti $|\psi_0\rangle$ és $|\phi_0\rangle$ állapotvektor esetén

$$c \equiv \langle\phi_0|\psi_0\rangle = \langle\phi(t)|\psi(t)\rangle = (\hat{U}(t, t_0)\phi_0, \hat{U}(t, t_0)\psi_0) = \langle\phi_0|\hat{U}^{\dagger}(t, t_0)\hat{U}(t, t_0)|\psi_0\rangle \tag{2.1.14}$$

kell teljesüljön, ami akkor és csak akkor lehetséges, ha $\hat{U}^{\dagger}(t, t_0)\hat{U}(t, t_0) = \hat{1}$ az egységoperátor.

Alkalmazzuk az unitaritás feltételét az $\hat{U}(t+\delta t, t_0)$ evolúciós operátorra:

$$\begin{aligned}
\hat{1} + \mathcal{O}((\delta t)^2) &= [\hat{U}(t+\delta t, t_0)]^{-1}\hat{U}(t+\delta t, t_0) = [\hat{U}(t+\delta t, t_0)]^{\dagger}\hat{U}(t+\delta t, t_0) \\
&= \Big(\hat{U}(t,t_0)\Big)^{\dagger}\Big(\hat{1} + \frac{i}{\hbar}\delta t\hat{H}^{\dagger}\Big)\Big(\hat{1} - \frac{i}{\hbar}\delta t\hat{H}\Big)\hat{U}(t,t_0) \\
&= \hat{1} + \frac{i}{\hbar}\delta t\Big(\hat{U}(t,t_0)\Big)^{\dagger}\Big(\hat{H}^{\dagger} - \hat{H}\Big)\hat{U}(t,t_0) + \mathcal{O}((\delta t)^2),
\end{aligned} \tag{2.1.15}$$

ahonnan

$$\hat{H}^{\dagger} = \hat{H} \tag{2.1.16}$$

adódik. Ez azt jelenti, hogy **a Hamilton-operátor lineáris, önadjungált operátor.**

2.1.3. A Hamilton-operátor fizikai jelentése

Miután **a $\hat{H}$ Hamilton-operátor** önadjungált, azért ez az operátor is **fizikai mennyiség operátora.** Kérdés, hogy mi az a fizikai mennyiség, amelynek operátora a $\hat{H}$ Hamilton-operátor. A Schrödinger-egyenlet (2.1.1) alakjából látszik, hogy a $\hat{H}$ operátor határozza meg, hogy infinitezimális időbeli eltolás során mennyivel változik meg a fizikai rendszer állapotvektora.

Tegyük fel, hogy a K inerciarendszerben nyugvó órák által mért időt t-vel jelöljük és a P pontban egy fényfelvillanás kijelöli azt az objektív időpillanatot, amelyet a K-ban nyugvó órák t_P-nek mutatnak. Legyen K' egy másik inerciarendszer, amelyik K-hoz képest nyugalomban van és csak abban különbözik K-tól, hogy a K'-ben nyugvó órák (amelyek egyébként K-ban is nyugalomban vannak) akkor mutattak $t' = 0$-t, amikor a K-hoz tartozó órák $t = -\delta t$ időt mutattak. Ekkor a P-ben történt fényfelvillanáshoz K'-ben a $t'_P = t_P + \delta t$ időpillanat tartozik. A vizsgált fizikai rendszer $|\psi_P\rangle$ állapotvektora a fényfelvillanás objektív pillanatában, mint az idő függvénye

$$|\psi_P\rangle = |\psi(t_P)\rangle = |\psi'(t'_P)\rangle \tag{2.1.17}$$

határozza meg rendre a K, ill. az „időben eltolt" K' rendszerben a hullámvektor időfüggését, ahol az objektív időpillanat tetszőleges lehet. Ha felhasználjuk a (2.1.1) Schrödinger-egyenletet, akkor írhatjuk, hogy

$$\begin{aligned}
|\psi(t_P)\rangle &= |\psi'(t'_P)\rangle = |\psi'(t_P+\delta t)\rangle \\
&= |\psi'(t_P)\rangle - \frac{i\delta t}{\hbar}\hat{H}(t_P)|\psi'(t_P)\rangle,
\end{aligned} \tag{2.1.18}$$

azaz a hullámvektor megváltozása az órák nullhelyzetének infinitezimális eltolása (az infinitezimális időbeli eltolás) következtében

$$|\psi'(t)\rangle - |\psi(t)\rangle = \frac{i\delta t}{\hbar}\hat{H}(t)|\psi'(t)\rangle = \frac{i\delta t}{\hbar}\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle + \mathcal{O}((\delta t)^2). \tag{2.1.19}$$

Látjuk tehát, hogy a hullámvektornak az infinitezimális időbeli eltolás miatti megváltozását a Hamilton-operátor határozza meg. Azt mondjuk, hogy a Hamilton-operátor az infinitezimális időbeli eltolás generátora.

Nézzük most meg, hogyan változik a H fizikai mennyiség értéke, ha a rendszer állapota a Schrödinger-egyenlet által meghatározott módon fejlődik és $\hat{H}$ nem függ explicit módon az időtől:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle &= \left(\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right)\hat{H}|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\hat{H}\left(\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\right)\\ &= -\frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|\hat{H}\hat{H}|\psi(t)\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|\hat{H}\hat{H}|\psi(t)\rangle = 0 \qquad (2.1.20)\end{aligned}$$

A $\hat{H}$ fizikai mennyiség tehát az időbeli infinitezimális eltolás során megmarad, ha nem függ az időtől explicit módon. Mindezek alapján azt mondhatjuk, hogy

1. **a $\hat{H}$ operátor az infinitezimális időbeli eltolásokat generálja;**
2. **ha a rendszer az időbeli eltolással szemben invariáns, azaz a $\hat{H}$ operátor nem függ az időtől, akkor a $\hat{H}$ az a mennyiség, amelyik ezen szimmetria következtében megmarad.**

A klasszikus fizikában meggyőződtünk arról, hogy az a mennyiség, amely a fizikai rendszer időbeli eltolással szemben mutatott szimmetriája következtében marad meg, a rendszer energiája. Ezt az értelmezést a kvantummechanikában is fenntartjuk. A $\hat{H}$ operátornak megfelelő fizikai mennyiség tehát a rendszer energiája. A klasszikus mechanikában láttuk, hogy az energia mint az általános koordináták és a hozzájuk kanonikusan konjugált impulzusok függvénye nem más, mint a rendszer Hamilton-függvénye. **Ha a megfeleltetési elvet és a Heisenberg-féle csererelációkat alkalmazzuk a klasszikus Hamilton-függvényre, akkor operátort kapunk, a $\hat{H}$ Hamilton-operátort, amely a klasszikus fizikai rendszernek megfelelő kvantummechanikai rendszer Hamilton-operátora. A továbbiakban elfogadjuk, hogy minden kvantummechanikai rendszernek van egy $\hat{H}$ Hamilton-operátora[16], amelynek várható értéke a rendszer energiája és amely pontosan megmondja, hogy mi az a fizikai rendszer, amelyet vizsgálunk.**

[16] Valójában csak a zárt, azaz a környezetével kölcsön nem ható, vagy pedig a külső térbe helyezett kvantummechanikai rendszernek értelmezhető a Hamilton-operátora. Akkor mondjuk, hogy a vizsgált rendszer külső térben van, ha a környezetével való kölcsönhatása leírható néhány, az időnek adott függvényeként változó paraméterrel. A külső térbe helyezett rendszer nem zárt, de azért létezik Hamilton-operátora, mert a környező testekkel való kölcsönhatása leírható ezzel a néhány paraméterrel, külső térrel, és nem igényli a környezet valamennyi szabadsági fokának részletes szerepeltetését. A külső tereket leíró paraméterek a környezet valamely kollektív viselkedését leíró úgynevezett **kollektív koordináták.** Ha a rendszer nem zárt, és a környezettel való kölcsönhatása nem írható le néhány, az idő adott függvényeként változó kollektív paraméterrel, külső térrel, akkor nem írhatunk fel olyan Hamilton-operátort, amely a csak a vizsgált rendszer szabadsági fokait tartalmazza és mégis számot ad annak környezettel való kölcsönhatásáról.

2.1.4. A Hamilton-operátor, mint fizikai modell

A klasszikus mechanikában a fizikai rendszer Hamilton-függvényét kellett explicit módon megadni, mint az általános koordináták és a hozzájuk kanonikusan konjugált impulzusok függvényét ahhoz, hogy egyértelműen megmondjuk, mi a vizsgált fizikai rendszer. **A kvantummechanikában a Hamilton-operátort kell explicit módon megadni, hogy egyértelműen megadjuk, mi az a kvantummechanikai rendszer, amelyet vizsgálunk.** Az egyszerűbb esetekben a Hamilton-operátor a rendszer részecskéinek helyzetét megadó Descartes-koordináták operátoraiból és a hozzájuk kanonikusan konjugált impulzusok operátoraiból alkotott kifejezés. Ha a részecskéknek a helykoordinátáikon és impulzuskomponenseiken kívül más szabadsági fokaik is vannak, mint pl. saját impulzusmomentumuk (spinjük), akkor a Hamilton-operátor azok operátoraitól is függhet. A kvantummechanika, mint elmélet egy keretet szolgáltat, amelynek segítségével tetszőleges fizikai rendszer ugyanazokkal a módszerekkel tárgyalható. Minden fizikai rendszer állapotvektorának időfüggését a Schrödinger-egyenlet határozza meg. A valóságos fizikai problémák megoldásához azonban ez a keret nem elegendő, szükséges egy fizikai modell, amelynek alapján megadjuk a rendszer Hamilton-operátorának explicit kifejezését. Ennek a modellnek a konkrét megalkotása az egyes fizikai rendszerek esetén a fizika egy nagyon fontos feladata. Sokszor szokás a fizikai rendszer modelljét magával a rendszer Hamilton-operátorával azonosítani.

2.2. Fizikai mennyiségek időfüggése

Legyen $f(t)$ tetszőleges fizikai mennyiség, amelynek operátora $\hat{f}(t)$ az időtől is függ explicit módon. Mi lesz a mozgásegyenletek általánosítása? Hogyan változik az idő függvényében egy tetszőleges fizikai mennyiség várható értéke? A választ a Schrödinger-egyenlet felhasználásával könnyen megkapjuk. Az f fizikai mennyiség várható értéke $\langle\psi(t)|\hat{f}(t)|\psi(t)\rangle$ a $|\psi(t)\rangle$ állapotú rendszerben. A várható érték idő szerinti első deriváltja:

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\hat{f}(t)|\psi(t)\rangle \\
&\quad= \left(\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right)\hat{f}(t)|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\hat{f}(t)\left(\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\right) + \langle\psi(t)|\left(\frac{d}{dt}\hat{f}(t)\right)|\psi(t)\rangle \\
&\quad= \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|\hat{H}(t)\hat{f}(t) - \hat{f}(t)\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\left(\frac{d}{dt}\hat{f}(t)\right)|\psi(t)\rangle. \qquad (2.2.1)
\end{aligned}$$

Az f fizikai mennyiséget megmaradó fizikai mennyiségnek nevezzük, ha várható értéke állandó, azaz nem függ az időtől. A (2.2.1) egyenletből a következőket olvashatjuk ki:

1. **Ha az f fizikai mennyiség operátora az időtől explicit módon nem függ, azaz $\frac{d}{dt}\hat{f}(t) = 0$, akkor az f fizikai mennyiség akkor és csak akkor megmaradó, ha az operátora felcserélhető a rendszer Hamilton-operátorával, azaz**
$$[\hat{f}, \hat{H}] = 0. \tag{2.2.2}$$

2. **Értelmezhetünk egy olyan $\dot{\hat{f}}$ operátort, amelynek várható értéke az $\hat{f}$ operátor várható értékének az idő szerinti első deriváltja tetszőleges állapotban:**
$$\dot{\hat{f}} \equiv \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{f}] + \frac{d}{dt}\hat{f}(t). \tag{2.2.3}$$
Például, ha $\hat{f} = \hat{x}$ az x helykoordináta operátora, akkor
$$\dot{\hat{x}} \equiv \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{x}] \tag{2.2.4}$$
operátort tekinthetjük a v_x sebességkomponens operátorának, mivel $\hat{x}$ nem függ explicit módon az időtől. Ez természetsen egy másképpen értelmezett sebesség, mint ahogy azt a klasszikus mechanikában vezettük be. Tudjuk azonban, hogy a határozatlansági elv értelmében a klasszikus mechanikai definíció nem tartható fenn. Általában a klasszikus mechanikában idő szerinti deriválással leszármaztatott mennyiségek kvantummechanikai megfelelőit a (2.2.3) szabállyal tudjuk konzisztens módon értelmezni.

Az f fizikai mennyiség akkor és csak akkor megmaradó, azaz a várható értéke tetszőleges állapotban akkor és csak akkor állandó az időben, ha az f mennyiséghez tartozó $\dot{\hat{f}}$ operátor azonosan zérus, azaz ha teljesül, hogy [17]
$$\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{f}] + \frac{d}{dt}\hat{f}(t) = 0. \tag{2.2.5}$$

2.3. Stacionárius állapotok

2.3.1. A stacionárius állapot fogalma és időfüggése

Tegyük fel, hogy a rendszer Hamilton-operátora nem függ az időtől explicit módon. **A stacionárius állapotok az időtől független Hamilton-operátor sajátállapotai.**

[17] A jegyzetben a kvantummechanikai folyamatok olyan leírásmódját használjuk, amikor a kvantumrendszer időbeli változását az állapotvektorának az időfüggése írja le. Ez az úgynevezett Schrödinger-kép. Ebben tárgyalásmódban a fizikai mennyiségek operátorai csak akkor függnek az időtől, ha ezt külső beavatkozás okozza. A bevezetett $\dot{\hat{f}}$ operátor nem derivált operátor, és az explicit időfüggés szerinti deriválás $d\hat{f}/dt$ vagy $\partial\hat{f}/\partial t$ jelölése nem okoz zavart.

Ezeket az jellemzi, hogy az időtől csak egy egységnyi abszolút értékű komplex fázisfaktor révén függenek.

Tekintsük a Schrödinger-egyenletet,

$$i\hbar\partial_t|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle, \tag{2.3.1}$$

és keressük azokat a megoldásait, amelyek a $\hat{H}$ Hamilton-operátornak sajátfüggvényei:

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = E|\psi(t)\rangle. \tag{2.3.2}$$

Mivel $\hat{H}$ hermitikus operátor, azért tudjuk, hogy a sajátértékek valósak, a sajátfüggvények pedig ortonormált teljes rendszert alkotnak. Indexeljük az egyes sajátértékeket és sajátvektorokat a sajátértékek monoton növekvő sorrendjében $n = 0, 1, 2, \ldots$ egész számokkal. (Feltesszük, hogy a rendszer véges térfogatban mozog, ekkor az energiasajátértékek mindig diszkrétek, továbbá, hogy a sajátértékek nem elfajultak.) Ekkor

$$\hat{H}|\psi_n(t)\rangle = E_n|\psi_n(t)\rangle \tag{2.3.3}$$

és a stacionárius állapotokra felírt Schrödinger-egyenlet

$$i\hbar\partial_t|\psi_n(t)\rangle = E_n|\psi_n(t)\rangle \tag{2.3.4}$$

alakot ölt, amelynek a megoldása

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}|\psi_n(t_0)\rangle, \tag{2.3.5}$$

ahol $|\psi_n(t_0)\rangle$ **az időtől független stacionárius állapotvektor. A stacionárius állapot állapotvektorának teljes időfüggése az** $e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}$ **fázisfaktorban jelenik meg.**

Természetesen **a stacionárius állapot energiája,**

$$E_n = \langle\psi_n(t)|\hat{H}|\psi_n(t)\rangle = \langle\psi_n(t_0)|\hat{H}|\psi_n(t_0)\rangle \tag{2.3.6}$$

a Hamilton-operátornak éppen az a sajátértéke, amelyhez a stacionárius állapot mint sajátvektor tartozik[18].

A legkisebb, E_0 **sajátértékhez tartozó sajátállapotot a rendszer alapállapotának nevezzük. Csak az a Hamilton-operátor tekinthető valóságos fizikai rendszer modelljének, amelyhez tartozó energiasajátértékek spektrumának**

[18]Előfordulhat, hogy valamely E_n energiasajátértékhez $d_n > 1$ dimenziós altér tartozik az állapottérben, amelynek vektorai mind ugyanahhoz az energiasajátértékhez tartozó sajátvektorok. Ilyenkor azt mondjuk, hogy az energiasajátérték, ill. a neki megfelelő energiaszint **elfajult** (degenerált), mégpedig annyiszorosan, amennyi az adott energia-sajátértékhez tartozó altér dimenziója. Ekkor választhatunk ebben az altérben a sajátvektorokból egy ortonormált bázist. Ezen bázisvektoroknak megfelelő stacionárius állapotok mind azonos $e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$ alakú időfüggéssel rendelkeznek.

van alsó korlátja. Ellenkező esetben a rendszernek nem lenne alapállapota, ami azt is jelentené, hogy a rendszerből korlátlanul lehetne energiát kinyerni. Ez pedig ellentmond a tapasztalatnak.

Az $E_n > E_0$ energiájú stacionárius állapotokat a rendszer **gerjesztett állapotainak** nevezzük, az $E_n - E_0$ energiakülönbségeket pedig **gerjesztési energiának.**

2.3.2. Fizikai mennyiségek várható értéke stacionárius állapotban

Legyen f tetszőleges olyan fizikai mennyiség, amelynek operátora nem függ explicit módon az időtől. Az ilyen fizikai mennyiség várható értéke stacionárius állapotban időben állandó:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\psi_n(t)|\hat{f}|\psi_n(t)\rangle &= -\frac{i}{\hbar}\langle\psi_n(t)|\hat{H}\hat{f}-\hat{f}\hat{H}|\psi_n(t)\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar}E_n[\langle\psi_n(t)|\hat{f}|\psi_n(t)\rangle - \langle\psi_n(t)|\hat{f}|\psi_n(t)\rangle] = 0. \qquad (2.3.7)\end{aligned}$$

Ez indokolja, hogy miért nevezzük az ilyen állapotot stacionáriusnak: van ugyan időfüggése az állapotvektornak, de valamennyi az időtől explicit módon nem függő fizikai mennyiség várható értéke független az időtől.

3. ALAPVETŐ FIZIKAI MENNYISÉGEK

Ebben a fejezetben az absztrakt állapotvektorok $\mathcal{H}$ terét függvények terével ábrázoljuk, a $\mathcal{H}$ állapottér vektorain ható lineáris operátorokat pedig az ábrázolási függvénytér felett ható lineáris operátorokkal. Megmutatjuk, hogy hogyan ábrázoljuk különböző hullámfüggvényekkel ugyanazt a fizikai állapotot ill. különböző mátrixokkal ugyanazon fizikai mennyiség operátorát attól függően, hogy a $\mathcal{H}$ állapottér melyik bázisát választjuk az állapotvektorok és operátorok ábrázolásának alapjául. Megmutatjuk, hogy a különböző bázisválasztásokból adódó ábrázolások mind ekvivalensek. Megkeressük továbbá a legfontosabb fizikai mennyiségeknek, mint pl. a Descartes-féle helykoordináta, a hozzá kanonikusan konjugált impulzuskomponens, az impulzusmomentum és a sajátimpulzusmomentum, vagyis a spin operátorának explicit alakját.

3.1. Az állapotok és az operátorok ábrázolása

3.1.1. Ismétlés: fizikai mennyiségek

A fizikai mennyiségekről azt tanultuk meg eddig, hogy nekik önadjungált operátorok felelnek meg. Az önadjungált operátorok sajátértékei valósak és azokat a megfelelő fizikai mennyiség lehetséges értékeivel azonosíthatjuk. Ezek alkotják az adott fizikai mennyiség spektrumát. Ha a fizikai rendszer az f fizikai mennyiség $\hat{f}$ operátorának $|\phi_n\rangle$ sajátállapotában van, akkor az f mennyiségnek ezen a rendszeren elvégzett mérése $w = 1$ valószínűséggel a $|\phi_n\rangle$ sajátállapothoz tartozó f_n sajátértéket szolgáltatja. A sajátértékre és a sajátvektorra fennáll a

$$\hat{f}|\phi_n\rangle = f_n|\phi_n\rangle \tag{3.1.1}$$

sajátértékegyenlet. Az f fizikai mennyiség $\hat{f}$ operátorának normált sajátvektorai a rendszer állapotterében ortonormált teljes rendszert alkotnak. Ez azt jelenti, hogy tetszőleges $|\psi\rangle$ állapot felbontható ezen $|\phi_n\rangle$ sajátvektorok lineáris kombinációjára:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|\phi_n\rangle, \tag{3.1.2}$$

ahol

$$c_n = \langle\phi_n|\psi\rangle, \tag{3.1.3}$$

és a sajátvektorok kielégítik a

$$\langle\phi_n|\phi_m\rangle = \delta_{n,m} \tag{3.1.4}$$

ortonormáltsági relációt. A c_n együtthatók általában komplex számok és a $|\psi\rangle$ állapot normáltsága miatt eleget tesznek a

$$\sum_n |c_n|^2 = 1 \tag{3.1.5}$$

feltételnek. Ezért az egyes valós $|c_n|^2$ tagok valószínűségek, annak a valószínűségei, hogy az f mennyiségnek a $|\psi\rangle$ állapoton elvégzett mérése a vizsgált rendszert az n-edik sajátértékhez tartozó $|\phi_n\rangle$ sajátállapotba viszi át[19]. Ha a tetszőleges $|\psi\rangle$ állapotú rendszeren elvégezzük az f fizikai mennyiség mérését, akkor valamelyik f_n sajátértéket kapjuk eredményül. Ha nagyon sokszor, egymástól függetlenül ismételjük meg az f mérését jelentő kísérletet, azz ugyanazon rendszernek ugyanabban a $|\psi\rangle$ állapotban levő ,,másolatain" végezzük el az f mérését, akkor bizonyos relaív gyakoriságokkal kapjuk az egyes lehetséges f_n értékeket, mint mérési eredményeket az egyes egyedi kísérletekben. A kísérletek számával végtelenhez tartva, ezek a relatív gyakoriságok meghatározott határértékekhez, a $w_n = |c_n|^2$ valószínűségekhez tartanak. Az állapot normáltsága biztosítja, hogy az összes lehetséges eredmény valószínűségeinek összege 1. Azt mondjuk ilyenkor, hogy az f mennyiségnek a $|\psi\rangle$ állapotban az értéke az

$$\begin{aligned}\bar{f} = \langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle &= \sum_{n,m} c_n^* c_m \langle\phi_n|\hat{f}|\phi_m\rangle = \sum_{n,m} c_n^* c_m f_m \delta_{n,m} = \sum_n |c_n|^2 f_n \\ &= \sum_n |\langle\phi_n|\psi\rangle|^2 f_n \end{aligned} \tag{3.1.6}$$

várható érték. Ezt - mint látjuk - a valószínűségszámítás szokásos szabálya szerint kell kiszámítani: az egyes lehetséges értékeket szorozni kell előfordulásuk valószínűségével, majd a kapott szorzatokat összeadni. Az egyedi f_n mérési eredmények szórása általában jelentős, ezt az f mennyiség bizonytalanságának, vagy határozatlanságának nevezzük:

$$\Delta f = \left[\sum_n |c_n|^2 (f_n - \bar{f})^2\right]^{\frac{1}{2}}. \tag{3.1.7}$$

Végül, az egységoperátort felbonthatjuk az $\hat{f}$ operátor sajátaltereire vetítő projektor-operátorok összegére. **Az egységfelbontást** a fenti esetben (amikor minden sajátaltér egy-dimenziós) ormálisan az alábbiak szerint kapjuk:

$$\hat{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\psi\rangle, \tag{3.1.8}$$

ahonnan

$$\hat{1} = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|. \tag{3.1.9}$$

A megfelelő matematikai háttér részletes ismertetése nélkül megadjuk a fenti összefüggések általánosítását arra az esetre, ha az f fizikai mennyiség spektruma folytonos, azaz az $f' \in I_f$

[19] Az egyszerűség kedvéért tekintsünk el attól az esettől, amikor a sajátértékek elfajultak és egynél nagyobb dimenziós sajátalterek tartoznak hozzájuk. A fentieknek erre az esetre történő általánosítása kézenfekvő, de meghaladja a jelen jegyzet kereteit. Ugyancsak nem fogunk annak az esetnek a finom matematikai elemzésével foglalkozni, amikor a sajátértékek folytonosak és a véges normájú állapotok definíciója mélyebb megfontolást igényel.

értékeket veheti fel, ahol I_f a valós számegyenes egy intervalluma. Ekkor a $\mathcal{H}$ Hilbert-tér ,,beágyazható" egy olyan bővebb vektortérbe, amelyban az

$$\hat{f}|\psi_{f'}\rangle = f'|\psi_{f'}\rangle \tag{3.1.10}$$

sajátértékegyenletnek vannak megoldásai, s azok ortonormált teljes rendszert alkotnak a

$$\langle\psi_{f''}|\psi_{f'}\rangle = \delta(f'' - f') \tag{3.1.11}$$

ortonormáltsági relációt elégítve ki. Ezek a $|\psi_{f'}\rangle$ vektorok nincsenek benne a Hilbert-térben, nem felelnek meg valódi fizikai állapotoknak, de mégis minden $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ 1-re normált Hilbert-térből vett állapotvektor előállíthaó a $|\psi_{f'}\rangle$ teljes rendszer vektorainak lineáris kombinációjaként:

$$|\psi\rangle = \int_{I_f} df' c_{f'}|\psi_{f'}\rangle, \qquad c_{f'} = \langle\psi_{f'}|\psi\rangle \tag{3.1.12}$$

alakban. Ekkor $|c_{f'}|^2 df'$ annak a valószínűsége, hogy f értékét a mérés az $(f', f' + df')$ intervallumban találja. Nyilvánvalóan az is teljesül, hogy

$$\int_{I_f} df' |c_{f'}|^2 = 1. \tag{3.1.13}$$

Az egységfelbontás

$$\hat{1} = \int_{I_f} df' |\psi_{f'}\rangle\langle\psi_{f'}| \tag{3.1.14}$$

alakot ölt. A $|\psi\rangle$ állapotban az f fizikai mennyiség várható értéke

$$\bar{f} = \langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle = \int_{I_f} df' \ f' \ |c_{f'}|^2, \tag{3.1.15}$$

a szórása pedig

$$\Delta f = \left[\int_{I_f} df' (f' - \bar{f})^2 |c_{f'}|^2\right]^{\frac{1}{2}}. \tag{3.1.16}$$

További általánosítás, ha a spektrumnak egyaránt van diszkrét és folytonos része. Ekkor a fenti összefüggések – értelemszerűen – rendre az alábbiak szerint módosulnak:

$$\begin{aligned}
&\langle\psi_{f''}|\psi_{f'}\rangle = \delta(f'' - f'), \quad \langle\psi_{f_n}|\psi_{f_m}\rangle = \delta_{n,m}, \quad \langle\psi_{f'}|\psi_{f_n}\rangle = 0;\\
&|\psi\rangle = \int_{I_f} df' c_{f'}|\psi_{f'}\rangle + \sum_n c_n|\psi_{f_n}\rangle,\\
&c_{f'} = \langle\psi_{f'}|\psi\rangle, \quad c_n = \langle\psi_{f_n}|\psi\rangle;\\
&\hat{1} = \int_{I_f} df' |\psi_{f'}\rangle\langle\psi_{f'}| + \sum_n |\psi_{f_n}\rangle\langle\psi_{f_n}|,\\
&1 = \int_{I_f} df' |c_{f'}|^2 + \sum_n |c_n|^2,\\
&\bar{f} = \int_{I_f} df' \ f' \ |c_{f'}|^2 + \sum_n f_n |c_n|^2,\\
&\Delta f = \left[\int_{I_f} df' (f' - \bar{f})^2 \ |c_{f'}|^2 + \sum_n (f_n - \bar{f})^2 |c_n|^2\right]^{\frac{1}{2}}.
\end{aligned} \tag{3.1.17}$$

3.1.2. Az állapottér vektorainak lineáris ábrázolása

Az általános kvantummechanikai szabályokat el tudtuk mondani a $|\psi\rangle$ állapotvektorok és az állapottéren ható lineáris operátorok absztrakt fogalmainak segítségével. **Ahhoz azonban, hogy tényleges számolásokat tudjunk végezni konkrét fizikai rendszerekre vonatkozóan, az absztrakt állapotvektoroknak kölcsönösen egyértelműen függvényeket kell megfeleltetni, ezt az állapotvektorok függvényekkel történő ábrázolásának nevezzük. Az absztrakt állapotvektort ábrázoló függvényt nevezzük hullámfüggvénynek. A matematikus ábrázolás alatt azt érti, hogy az állapotvektorok terét egy-egy értelműen le kell képezni valamilyen függvények terére. Ezzel együtt az állapotvektorok tere felett ható operátorokat is le kell képezni a megfelelő függvénytér felett ható operátorokra. Az ábrázolást megvalósító leképezéssel szemben, a kölcsönös egyértelműségen túl néhány további fontos követelmény van:**

1. **Legyen lineáris,** hogy a lineáris szuperpozíció elvével összhangban legyen, azaz szuperponált állapot hullámfüggvénye a szuperpozícióban résztvevő állapotok hullámfüggvényeinek ugyanolyan együtthatókkal vett lineáris kombinációja legyen.

2. **Tartsa meg a skalárszorzatot,** hogy az átmeneti amplitudók és valószínűségek, ill. a fizikai mennyiségek várható értékei ne változzanak.

3. **Tartsa meg a Heisenberg-féle egyidejű csererelációkat,** amelyek a kvantálás szabályai. Ez a követelmény az előzőekből következően már teljesül.

Az állapottér ábrázolása a következőképpen történik:

1. Választunk egy tetszőleges F fizikai mennyiséget és a neki megfelelő $\hat{F}$ operátor $|F\rangle$ sajátvektorainak ortonormált teljes rendszerét:

$$\hat{F}|F\rangle = F|F\rangle, \qquad \langle F'|F\rangle = \delta_{F,F'} \tag{3.1.18}$$

   Az $|F\rangle$ sajátállapotok ortonormált bázist alkotnak az állapotok terében.

2. Tetszőleges $|\psi\rangle$ állapotvektort kifejthetünk a választott $|F\rangle$ ortonormált bázis szerint:

$$|\psi\rangle = \sum_F c_F|F\rangle, \qquad c_F = \langle F|\psi\rangle, \tag{3.1.19}$$

   ahol a c_F komplex számoknak az F sajátérték növekvő rendje szerint rendezett sorozatát végtelen elemű oszlopvektornak tekinthetjük. Az állapottérben c_F mondja meg, hogy mekkora a $|\psi\rangle$ állapotvektornak az $|F\rangle$ bázisvektor irányába eső vetülete.

Ha F folytonosan veszi fel az értékeit a számegyenesen, akkor a $\sum_F \to \int dF$ helyettesítést kell formálisan végazni, és ekkor

$$c_F = \langle F|\psi\rangle \equiv \psi(F) \tag{3.1.20}$$

az F változó függvénye, amelyet **a rendszer $\psi(F)$ hullámfüggvényének nevezünk.** Ha F diszkrét értékeket vesz fel, akkor $c_F = \psi(F)$-et diszkrét pontokban értelmezett függvénynek tekinthetjük. A korábbiakból következik, hogy a **hullámfüggvény abszolút értéke négyzeténk valószínűségi jelentése van:**

(a) **folytonos spektrum esetén $|\psi(F)|^2 dF$ annak a valószínűsége, hogy a $|\psi\rangle$ állapotú rendszeren F mérését elvégezve, az eredmény az $(F, F + dF)$ intervallumba esik;**

(b) **diszkrét spektrum esetén $|\psi(F_n)|^2$ annak a valószínűsége, hogy a $|\psi\rangle$ állapotú rendszeren F mérését elvégezve, az eredmény F_n lesz.**

3. Az $|F\rangle$ ortonormált bázisvektorok, az $|\psi\rangle$ pedig normált állapotvektor. Következésképpen:

$$\begin{aligned} 1 = \langle\psi|\psi\rangle &= \sum_{F',F} c^*_{F'} c_F \langle F'|\hat{1}|F\rangle = \sum_{F',F} c^*_{F'} c_F \langle F'|F\rangle = \sum_{F',F} c^*_{F'} c_F \delta_{F',F} \\ &= \sum_F |c_F|^2 = \sum_F |\psi(F)|^2. \end{aligned} \tag{3.1.21}$$

Ez folytonos F értékek esetén azt jelenti, hogy

$$\int dF |\psi(F)|^2 = 1, \tag{3.1.22}$$

azaz hogy **a hullámfüggvény négyzetesen integrálható és abszolút értéke négyzetének integrálja 1.**

4. Két tetszőleges

$$|\psi\rangle = \sum_F c_F |F\rangle, \qquad |\phi\rangle = \sum_F b_F |F\rangle \tag{3.1.23}$$

állapotvektor skaláris szorzata

$$\langle\psi|\phi\rangle = \sum_{F',F} c^*_{F'} b_F \langle F'|F\rangle = \sum_F c^*_F b_F \tag{3.1.24}$$

alakban is írható, ami megadja **a skalárszorzat definícióját az ábrázolási térben, azaz a hullámfüggvények terében:**

$$\langle\psi|\phi\rangle = \sum_F \psi^*(F)\phi(F) \tag{3.1.25}$$

diszkrét spektrumú F mennyiség esetén, ill.

$$\langle\psi|\phi\rangle = \int dF \psi^*(F)\phi(F) \tag{3.1.26}$$

folytonos spektrumú F mennyiség esetén.

5. A $\mathcal{H}$ állapottér felett ható tetszőleges $\hat{O}$ lineáris operátort a $\psi(F)$ hullámfüggvények tere felett ható lineáris operátor, azaz $O_{F,F'}$ mátrix ábrázol, amelynek definiciója:

$$O_{F,F'} = \langle F|\hat{O}|F'\rangle. \tag{3.1.27}$$

Ezt az alábbiakból látjuk:

(a) A $\hat{O}|\psi\rangle$ vektor képe a $\Psi(F) \equiv \langle F|\hat{O}|\psi\rangle$ hullámfüggvény, amely egy $|F\rangle$ bázisvektorokból álló teljes rendszer szerinti egységfelbontás, $\hat{1} = \sum_{F'} |F'\rangle\langle F'|$ beszúrásával a következő alakba írható:

$$\Psi(F) = \langle F|\hat{O}|\psi\rangle = \sum_{F'} \langle F|\hat{O}|F'\rangle\langle F'|\psi\rangle = \sum_{F'} O_{F,F'}\psi(F'). \tag{3.1.28}$$

Az $\hat{O}$ operátor hatása tehát a hullámfügvények terében ekvivalens az $O_{F,F'}$ mátrix hatásával. Folytonos spektrumú F mennyiség esetén ez a mátrix folytonos indexű és

$$\Psi(F) = \int dF' O_{F,F'}\psi(F'). \tag{3.1.29}$$

(b) Tetszőleges f fizikai mennyiség várható értéke

$$\bar{f} = \langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle = \sum_{F',F} c^*_{F'} c_F \langle F'|\hat{f}|F\rangle = \sum_{F',F} \psi^*(F')\psi(F) f_{F',F} \tag{3.1.30}$$

alakban fejezhető ki a $\psi(F)$ hullámfüggvény és az

$$f_{F',F} = \langle F'|\hat{f}|F\rangle \tag{3.1.31}$$

mátrix segítségével.

6. Könnyű ellenőrizni, hogy önadjungált ill. unitér operátornak a (3.1.24) skalárszorzatra nézve rendre önadjungált, ill. unitér mátrix felel meg.

Legyen $\hat{f}$ önadjungált operátor, ekkor

$$(f_{F',F})^{t*} = (f_{F,F'})^* = [\langle F|\hat{f}|F'\rangle]^* = [\langle F'|\hat{f}^t|F\rangle]^* = \langle F'|\hat{f}^\dagger|F\rangle = \langle F'|\hat{f}|F\rangle = f_{F',F}, \tag{3.1.32}$$

azaz a megfelelő $f_{F',F}$ mátrix is önadjungált.

Legyen $\hat{U}$ unitér operátor, ekkor

$$(U_{F,F'})^* = (U^{t*})_{F',F} = \langle F'|\hat{U}^\dagger|F\rangle = \langle F'|\hat{U}^{-1}|F\rangle = (U^{-1})_{F',F}, \tag{3.1.33}$$

azaz az U mátrix adjungáltja azonos az U mátrix inverzével.

7. Ha vesszük az állapottérnek az F- és a G-ábrázolását, ahol F és G tetszőleges, egymástól különböző fizikai mennyiségek, akkor létezik olyan $U(G \leftarrow F)$ unitér transzformáció, amely az egyik ábrázolást átviszi a másikba úgy, hogy a $|\psi\rangle$ állapot F-képét annak G-képébe és tetszőleges $\hat{f}$ lineáris operátor F-ábrázolásbeli $f_{F,F'}$ mátrixát annak a G-ábrázolásbeli $f_{G,G'}$ mátrixába.

   Induljunk ki a $|\psi\rangle$ állapotvektor G-ábrázolásbeli $\psi(G)$ hullámfüggvényéből és fejezzük ki azt az F-ábrázolásbeli $\psi(F)$ hullámfüggvénnyel:

$$\psi(G) = \langle G|\psi\rangle = \sum_F \langle G|F\rangle\langle F|\psi\rangle = \sum_F \langle G|F\rangle\psi(F). \tag{3.1.34}$$

   Látjuk, hogy a hullámfüggvényt a $B_{G,F} = \langle G|F\rangle$ mátrix transzformálja az F ábrázolásból a G ábrázolásba. Fordítva, nyilvánvalóan a $C_{F,G} = \langle F|G\rangle$ mátrix transzformál a G ábrázolásból az F ábrázolásba. Ugyanakkor a skalárszorzat tulajdonsága miatt $C_{F,G} = (B_{G,F})^{t*} = (B^\dagger)_{F,G}$, azaz az inverz transzformáció $C = B^{-1}$ mátrixa éppen az eredeti transzformáció mátrixának adjungáltja. Az $U(G \leftarrow F)$ transzformáció mátrixa tehát az $U_{G,F} = \langle G|F\rangle$ unitér mátrix, annak a bázistranszformációnak a mátrixa, amelynek segítségével a $|F\rangle$ bázisról át tudunk térni a $|G\rangle$ bázisra.

   A bázistranszformáció $U = U_{G,F}$ mátrixa segítségével tetszőleges $\hat{O}$ lineáris operátor mátrixát is transzformálni tudjuk az F ábrázolásból a G ábrázolásba:

$$O_{G,G'} = \langle G|\hat{O}|G'\rangle = \sum_{F,F'} \langle G|F\rangle\langle F|\hat{O}|F'\rangle\langle F'|G'\rangle = \sum_{F,F'} U_{G,F} O_{F,F'} (U^\dagger)_{F',G'}. \tag{3.1.35}$$

A fentieket összegezve, az állapottér F-ábrázolása az alábbi megfeleltetést jelenti:

állapotvektor	$\|\psi\rangle$	$\leftrightarrow$	$\psi(F) = \langle F\|\psi\rangle$	hullámfüggvény
lineáris operátor	$\hat{O}$	$\leftrightarrow$	$O_{F',F} = \langle F'\|\hat{O}\|F\rangle$	mátrix
önadjungált operátor	$\hat{f}^\dagger = \hat{f}$	$\leftrightarrow$	$f^*_{F',F} = f_{F,F'}$	önadjungált mátrix
unitér operátor	$\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$	$\leftrightarrow$	$(U^{-1})_{F,F'} = U^*_{F',F}$	unitér mátrix

A hullámfüggvény értelmezési tartománya az F fizikai mennyiség spektruma. Folytonos spektrumú F mennyiség esetén a $\psi(F) = \langle F|\psi\rangle$ hullámfüggvény a valós számegyenes valamely intervallumán van értelmezve, a fizikai mennyiség $f_{F',F} = \langle F'|\hat{f}|F\rangle$ mátrixa pedig folytonos indexű mátrix. Diszkrét spektrumú F mennyiség esetén a hullámfüggvény a valós számegyenes diszkrét pontjaiban van értelmezve, az $f_{F',F}$ mátrix pedig diszkrét indexű mátrix. Folytonos spektrum esetén a sajátértékekre vonatkozó $\sum_F$ összegzést $\int dF$ integrállal kell helyettesíteni az F mennyiség spektrumának megfelelő intervallumon.

Az F-ábrázolásban magának az F mennyiségnek a mátrixa diagonális:

$$\langle F'|\hat{F}|F\rangle = F\langle F'|F\rangle = F\delta_{F',F}, \tag{3.1.36}$$

ahol a diagonálisban $\hat{F}$ sajátértékei, azaz az F mennyiség lehetséges értékei szerepelnek. Folytonos indexek esetén a $\delta_{F',F}$ Kronecker-deltát a $\delta(F' - F)$ Dirac-deltára kell cserélni.

Folytonos index esetén, $\delta_{F',F} = \delta(F' - F)$ a Dirac-delta.

A fenti, lineáris ábrázolás fontos következményei,

1. **hogy operátorok lineáris kombinációjának a megfelelő mátrixok ugyanolyan együtthatókkal képezett lineáris kombinációja felel meg,**
2. **hogy operátorok egymás utáni végrehajtásának a megfelelő mátrixok egymás utáni ugyanolyan sorrendű alkalmazása felel meg, ill. hogy**
3. **operátorok kommutátorának a megfelelő mátrixok kommutátora felel meg. Utóbbi azt is jelenti, hogy az absztrakt operátorokra vonatkozó Heisenberg-féle csererelációk „átörökítődnek" az ábrázolások mátrixaira.**

Az elmondottakból következnek az alábbi **számolási szabályok:**

1. Bármely $\hat{O} = 0$ alakú operátoregyenletet automatikusan mátrixegyenletté írhatunk át az F-ábrázolásban, ha balról tetszőleges $\langle F|$-val, jobbról tetszőleges $|F'\rangle$-tel szorozzuk:

$$\hat{O} = 0 \Longrightarrow \langle F|\hat{O}|F'\rangle = O_{F,F'} = 0. \tag{3.1.37}$$

Ha $\hat{O}$ operátorok szorzata, akkor a megfelelő mátrixegyenletet formálisan úgy kapjuk, hogy a tényezők közé egységoperátorokat „szúrunk be" $\hat{1} = \sum_F |F\rangle\langle F|$ alakban, pl. $\hat{O}_2\hat{O}_1 = 0$ a következő mátrixegyenletet jelenti:

$$\begin{aligned} 0 = \langle F|\hat{O}_2\hat{O}_1|F'\rangle = \langle F|\hat{O}_2\hat{1}\hat{O}_1|F'\rangle &= \sum_{F''} \langle F|\hat{O}_2|F''\rangle\langle F''|\hat{O}_1|F'\rangle \\ &= \sum_{F''} (O_2)_{F,F''}(O_1)_{F'',F'}. \end{aligned} \tag{3.1.38}$$

2. Bármely lineáris vektoregyenletet, $\hat{O}|\psi\rangle = 0$, automatikusan átírhatunk az F-ábrázolás $\langle F|\psi\rangle$ hullámfüggvényére vonatkozó egyenletté úgy, hogy az operátor és az állapotvektor közé „beszúrunk" egy egységfelbontást és az egyenletet balról szorozzuk tetszőleges $\langle F|$-val:

$$\begin{aligned} 0 = \langle F|\hat{O}|\psi\rangle = \langle F|\hat{O}\hat{1}|\psi\rangle &= \sum_{F'} \langle F|\hat{O}|F'\rangle\langle F'|\psi\rangle \\ &= \sum_{F'} O_{F,F'}\psi(F'), \end{aligned} \tag{3.1.39}$$

azaz

$$\hat{O}|\psi\rangle = 0 \Longrightarrow \sum_{F'} O_{F,F'}\psi(F') = 0. \tag{3.1.40}$$

3.2. A hullámfüggvény koordináta-reprezentációban

3.2.1. Pontrészecske

Talán a legkézenfekvőbb lehetőség, hogy **az ábrázolás alapjául szolgáló F fizikai mennyiségnek a Descartes-koordinátákat választjuk. Ez a koordináta-reprezentáció.** Egyetlen részecskéből álló rendszer esetén F szerepét a részecske helyzetvektorának 3 Descartes-komponense, (x, y, z) veszi át. A $|\psi\rangle$ állapotú részecske koordináta-hullámfüggvénye

$$|\psi\rangle \leftrightarrow \psi(x, y, z) = \langle x, y, z|\psi\rangle \tag{3.2.1}$$

három-változós függvény[20]. Itt $|x, y, z\rangle$ olyan állapotvektor, amely a Descartes-koordináták $\hat{x}$, $\hat{y}$ és $\hat{z}$ operátorainak közös sajátvektora:

$$\hat{x}|x, y, z\rangle = x|x, y, z\rangle, \qquad \hat{y}|x, y, z\rangle = y|x, y, z\rangle, \qquad \hat{z}|x, y, z\rangle = z|x, y, z\rangle, \tag{3.2.2}$$

amit tömören így jelölhetünk:

$$\hat{\vec{r}}|\vec{r}\rangle = \vec{r}|\vec{r}\rangle. \tag{3.2.3}$$

Ekkor az állapotvektorok skalárszorzata,

$$\begin{aligned}\langle\psi|\phi\rangle &= \int dx \int dy \int dz \langle\psi|x, y, z\rangle\langle x, y, z|\phi\rangle = \int dx \int dy \int dz \psi^*(x, y, z)\phi(x, y, z) \\ &= \int d\vec{r}\psi^*(\vec{r})\phi(\vec{r}),\end{aligned} \tag{3.2.4}$$

véges és ennek következménye, hogy a hullámfüggvény négyzetesen integrálható, azaz hogy az

$$\int dx \int dy \int dz |\psi(x, y, z)|^2 = \int d\vec{r}|\psi(\vec{r})|^2 \tag{3.2.5}$$

integrál véges. Ez biztosítja, hogy az állapotfüggvények is normálhatók:

$$\int dx \int dy \int dz |\psi(x, y, z)|^2 = \int d\vec{r}|\psi(\vec{r})|^2 = 1. \tag{3.2.6}$$

A az általános érvényű állítás, hogy tetszőleges F-ábrázolásban a $c(F)$ hullámfüggvény valószínűségi jelentéssel bír, most a következő tartalmat kapja: a

$$dw(\vec{r}) \equiv |\psi(x, y, z)|^2 dxdydz = |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} \tag{3.2.7}$$

infinitezimális mennyiség annak a $dw(\vec{r})$ valószínűsége, hogy a részecske az $\vec{r} = (x, y, z)$ pont környezetében felvett $dV = dxdydz = d\vec{r}$ infinitezimális térfogatelemben

[20] Ha $\mathcal{F}$ jelöli a négyzetesen integrálható egy-változós $f(x)$ függvények terét, akkor a $\psi(x, y, z)$ hullámfüggvény az $\mathcal{F} \otimes \mathcal{F} \otimes \mathcal{F}$ tenzori szorzattér eleme, mint 3-változós, négyzetesen integrálható függvény.

található. A normálási integrál azt jelenti, hogy a részecske az egész térben valahol bizonyosan, azaz 1 valószínűséggel megtalálható.

Az állapottérnek ezt az ábrázolását, amikor az állapotvektoroknak helykoordinátáktól függő, négyzetesen integrálható hullámfüggvényeket feleltetünk meg, az állapottér koordináta reprezentációjának, vagy sokszor csak röviden koordináta-reprezentációnak nevezzük. Alább a legfontosabb fizikai mennyiségek operátorait és sajátfüggvényeit fogjuk megadni koordináta-reprezentációban.

Ha megtaláltuk, hogy az $\hat{f}$ operátornak a koordináta-reprezentációban milyen $f_{x,y,z;x'y'z'}$ mátrix felel meg, akkor ennek a mátrixnak a segítségével írhatjuk, hogy

$$\langle\phi|\hat{f}|\psi\rangle = \int dxdydzdx'dy'dz'\phi^*(x,y,z)f_{x,y,z;x',y',z'}\psi(x',y',z'), \tag{3.2.8}$$

ahol $\phi(x,y,z)$ és $\psi(x,y,z)$ tetszőleges állapotok hullámfüggvényei. Ha az f fizikai mennyiség mátrixa koordináta-reprezentációban diagonális, azaz

$$f_{x,y,z;x',y',z'} = \hat{f}_{x,y,z}[\delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')] \equiv \hat{f}_{\vec{r}}\delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \tag{3.2.9}$$

alakú, ahol $\hat{f}_{x,y,z} = \hat{f}_{\vec{r}}$ az x, y és z koordináták függvényére ható differenciáloperátor, akkor a fizikai mennyiség operátorának tetszőleges $|\psi\rangle$ állapotvektorra a hatása az $\langle\vec{r}|\psi\rangle$ hullámfüggvényből az

$$\begin{aligned}\langle\vec{r}|\hat{f}|\psi\rangle &= \int d\vec{r}'\langle\vec{r}|\hat{f}|\vec{r}'\rangle \\ &= \int d\vec{r}'\hat{f}_{\vec{r}}\delta(\vec{r}-\vec{r}')\psi(\vec{r}') \\ &= \hat{f}_{\vec{r}}\psi(\vec{r})\end{aligned} \tag{3.2.10}$$

függvényt állítja elő. Az $\hat{f}_{x,y,z} = \hat{f}_{\vec{r}}$ operátort az $\hat{f}$ operátor koordináta-reprezentációbeli alakjának szoktuk nevezni. Tetszőleges $|\phi\rangle$ és $|\psi\rangle$ állapotok között az $\hat{f}$ operátor mátrixeleme az alábbi lakban írható:

$$\langle\phi|\hat{f}|\psi\rangle = \int dxdydz\phi^*(x,y,z)\hat{f}_{x,y,z}\psi(x,y,z) = \int d\vec{r}\phi^*(\vec{r})\hat{f}_{\vec{r}}\psi(\vec{r}). \tag{3.2.11}$$

A $\hat{f}_{x,y,z} = \hat{f}_{\vec{r}}$ operátort az $\hat{f}$ operátor koordinátareprezentációbeli alakjának szoktuk nevezni.

A korábban elmondottak értelmében az $\hat{x}$ koordináta-operátort az

$$\langle x',y',z'|\hat{x}|x,y,z\rangle = x\langle x',y',z'|x,y,z\rangle = x\delta(x'-x)\delta(y'-y)\delta(z'-z) \tag{3.2.12}$$

folytonos indexű diagonális mátrix ábrázolja a koordináta-reprezentációban, azaz

$$\hat{x}|\psi\rangle \leftrightarrow \langle x,y,z|\hat{x}|\psi\rangle = \int dx'dy'dz'\langle x,y,z|\hat{x}|x',y',z'\rangle\langle x',y',z'|\psi\rangle$$
$$= \int dx'dy'dz'x'\delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')\psi(x',y',z') = x\psi(x,y,z), \tag{3.2.13}$$

azaz **a koordináta-operátor hatása a koordináta-hullámfüggvényre egyszerűen a megfelelő koordinátával való szorzás.** Mivel hasonló összefüggés valamennyi Descartes-koordinátára igaz, tömören írhatjuk, hogy

$$\hat{\vec{r}}|\psi\rangle \leftrightarrow \langle\vec{r}'|\hat{\vec{r}}|\psi\rangle = \hat{\vec{r}}_{\vec{r}}\langle\vec{r}'|\psi\rangle = \vec{r}'\psi(\vec{r}'). \tag{3.2.14}$$

3.3. A helykoordináta és az impulzus

3.3.1. A helykoordináta operátorának sajátérték-egyenlete

Koordináta-reprezentációban a Descartes-koordináta operátorát a

$$\langle x'|\hat{x}|x\rangle = x\delta(x-x') \tag{3.3.1}$$

folytonos indexű mátrix ábrázolja. Ennek következtében a koordináta operátora úgy hat a koordináta-reprezentációban felírt hullámfüggvényre, hogy szorozza azt:

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x). \tag{3.3.2}$$

Mielőtt továbbmegyünk, tegyük fel a kérdést, hogy melyek a koordináta-operátor sajátfüggvényei, azaz hogy mi a megoldása az

$$\hat{x}\psi_{x_0}(x) = x_0\psi_{x_0}(x) \tag{3.3.3}$$

sajátértékegyenletnek. A válasz az, hogy a négyzetesen integrálható függvények között nem található ilyen függvény. Ha azonban a függvény fogalmát kiterjesztjük és többek között megengedjük közöttük a Dirac-deltát is, akkor már találunk megoldást a sajátérték-egyenlethez:

$$\psi_{x_0}(x) = \delta(x-x_0), \tag{3.3.4}$$

hiszen

$$x\psi_{x_0}(x) = x\delta(x-x_0) = x_0\delta(x-x_0). \tag{3.3.5}$$

A $\psi_{x_0}(x) = \delta(x-x_0)$ függvények, ahol x_0 végig fut a valós tengelyen, nem normálhatók a szokásos értelemben. Teljesítenek azonban egy **általánosított ortonormáltsági relációt:**

$$\int dx\psi^*_{x_0'}(x)\psi_{x_0}(x) = \delta(x_0-x_0') \tag{3.3.6}$$

ugyanis

$$\int dx\delta(x-x_0')\delta(x-x_0)=\delta(x_0-x_0')\int dx\delta(x-x_0)=\delta(x_0-x_0'). \tag{3.3.7}$$

Ezenkívül **bármelyik $\psi(x)$ hullámfüggvény egyértelműen kifejthető a koordináta-sajátfüggvények szerint:**

$$\psi(x)=\int dx'\delta(x-x')\psi(x')=\int dx'\psi(x')\psi_{x'}(x), \tag{3.3.8}$$

ahol

$$\psi(x')=\int_x \psi_{x'}^*(x)\psi(x) \tag{3.3.9}$$

a kifejtési együtthatók. Elmondott tulajdonságaiknál fogva a koordináta sajátfüggvények annak ellenére hasznosak a kvantumfizikai számítások során, hogy nem jelentenek fizikai állapotokat.

A (3.3.8) egyenlet úgy is értelmezhető, hogy $|\psi\rangle=\hat{1}|\psi\rangle$ koordináta-reprezentációban kiírt alakja, ahol

$$\hat{1}=\int_{-\infty}^{\infty} dx_0|x_0\rangle\langle x_0| \tag{3.3.10}$$

hiszen ennek mátrixa koordináta-sajátvektorok bázisában éppen

$$\langle x'|\hat{1}|x\rangle=\langle x'|x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty} dx_0\langle x'|x_0\rangle\langle x_0|x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty} dx_0\delta(x'-x_0)\delta(x_0-x)=\delta(x'-x). \tag{3.3.11}$$

3.3.2. Az impulzus Descartes-komponensének operátora

Keressük meg most az impulzus p_x Descartes-komponensének operátorát koordináta-reprezentációban. Tudjuk, hogy reprezentációtól függetlenül fenn kell állnia a Heisenberg-féle csererelációnak:

$$[\hat{x},\hat{p}_x]=i\hbar. \tag{3.3.1}$$

Olyan $\langle x'|\hat{p}_x|x\rangle$ mátrixot kell tehát keresni, amelyre teljesül, hogy

$$\int dx''(\langle x|\hat{x}|x''\rangle\langle x''|\hat{p}_x|x'\rangle-\langle x|\hat{p}_x|x''\rangle\langle x''|\hat{x}|x'\rangle)=i\hbar\delta(x'-x). \tag{3.3.2}$$

Behelyettesítve a koordinátaoperátor ismert mátrixelemét,

$$\int dx''[\delta(x-x'')x\langle x''|\hat{p}_x|x'\rangle-\langle x|\hat{p}_x|x''\rangle\delta(x''-x')x']=i\hbar\delta(x'-x), \tag{3.3.3}$$

azaz

$$(x-x')\langle x|\hat{p}_x|x'\rangle=i\hbar\delta(x'-x) \tag{3.3.4}$$

adódik. Ennek a megoldása

$$\langle x|\hat{p}_x|x'\rangle = -\frac{\hbar}{i}\partial_{x'}\delta(x'-x), \tag{3.3.5}$$

mert tetszőleges $\psi(x)$ függvény esetén:

$$\begin{aligned}
-\int dx'(x-x')\frac{\hbar}{i}[\partial_{x'}\delta(x'-x)]\psi(x') &= \frac{\hbar}{i}\int dx'\delta(x'-x)\partial_{x'}[(x-x')\psi(x')] \\
&= -i\hbar\int dx'\delta(x'-x)[(x-x')\partial_{x'}\psi(x') - \psi(x')] \\
&= i\hbar\int dx'\delta(x'-x)\psi(x'). \qquad (3.3.6)
\end{aligned}$$

Az impulzus Descartes-komponensének operátora tehát ebben a reprezentációban a következőképpen hat a koordináta-hullámfüggvényre:

$$\begin{aligned}
\int dx'\langle x|\hat{p}_x|x'\rangle\psi(x') &= \int dx'\left[-\frac{\hbar}{i}\partial_{x'}\delta(x'-x)\right]\psi(x') = \\
&= \frac{\hbar}{i}\int dx'\delta(x'-x)\partial_{x'}\psi(x') = \frac{\hbar}{i}\partial_x\psi(x) \equiv \hat{p}_x\psi(x). \qquad (3.3.7)
\end{aligned}$$

Az impulzus p_x komponensének a koordináta-reprezentációban a $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\partial_x$ operátor felel meg.

A 3-dimenziós térben a részecske impulzusvektora minden Descartes-komponensének hasonló alakú differenciáloperátor felel meg, amelyeket vektoralakban foglalhatunk össze[21]:

$$\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}. \tag{3.3.9}$$

3.3.3. Az impulzus Descartes-komponense operátorának sajátfüggvényei

Feltesszük a kérdést, hogy melyek az impulzus Descartes-komponense operátorának a sajátfüggvényei:

$$\hat{p}_x\psi_{p_x}(x) = p_x\psi_{p_x}(x). \tag{3.3.1}$$

A válasz most is hasonló, mint a koordináta-sajátfüggvények keresése esetén: a véges normájú függvények között nem találunk ilyen sajátfüggvényt. Ez azt jelenti,

[21] Korábban megtanultuk, hogy a nabla-operátor olyan „vektor-operátor”, amelynek Descartes-komponensei rendre a

$$\nabla_x = \frac{\partial}{\partial x}, \quad \nabla_y = \frac{\partial}{\partial y}, \quad \nabla_z = \frac{\partial}{\partial z} \tag{3.3.8}$$

differenciál-operátorok.

hogy szigorúan véve nincsen olyan fizikai állapot, amikor az impulzus Descartes-komponense jól meghatározott értékkel rendelkezik. **A kibővített függvények terében azonban találhatunk olyan, nem véges normájú, általánosított értelemben vett függvényeket, amelyek sajátfüggvényei az impulzus Descartes-komponense operátorának:**

$$\psi_{p_x}(x) = \mathcal{N} e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}, \tag{3.3.2}$$

ahol $p_x \in (-\infty, \infty)$ jelöli a sajátértékeket, $\mathcal{N}$ pedig normálási tényező. A normálási tényezőt úgy választjuk, hogy összhangban legyünk a koordináta-sajátvektorokra vonatkozó

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x' - x) \tag{3.3.3}$$

normálási feltétellel és az egység-felbontás konvencionális

$$\hat{1} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{2\pi\hbar} |p_x\rangle\langle p_x| \tag{3.3.4}$$

alakjával, ezért választásunk

$$\mathcal{N} = 1. \tag{3.3.5}$$

Valóban,

$$\begin{aligned} \langle x''|x'\rangle &= \langle x''|\hat{1}|x'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{2\pi\hbar} \langle x''|p_x\rangle\langle p_x|x'\rangle = |\mathcal{N}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p_x (x''-x')} \\ &= |\mathcal{N}|^2 \delta(x''-x') = \delta(x''-x'), \end{aligned} \tag{3.3.6}$$

úgyhogy a $\mathcal{N} = 1$ választás megfelelő.

Az

$$\psi_{p_x}(x) = e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} \tag{3.3.7}$$

impulzus-sajátfüggvények kielégítik az alábbi **általánosított ortonormáltsági feltételt:**

$$\langle p'_x|p_x\rangle = \int dx \psi^*_{p'_x}(x)\psi_{p_x}(x) = 2\pi\hbar\delta(p'_x - p_x). \tag{3.3.8}$$

Továbbá **ezek a függvények is teljes rendszert alkotnak, azaz tetszőleges** $\psi(x)$ **függvény egyértelműen kifejthető szerintük:**

$$\psi(x) = \int \frac{dp_x}{2\pi\hbar} C(p_x) e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}, \tag{3.3.9}$$

ahol

$$C(p_x) = \int dx e^{-\frac{i}{\hbar} p_x x} \psi(x). \tag{3.3.10}$$

Ha a szimbólikus

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{2\pi\hbar} C(p_x)|p_x\rangle \tag{3.3.11}$$

alakba írjuk tetszőleges állapotvektor impulzus-sajátállapotok szerinti kifejtését, akkor innen a $|\psi\rangle$ állapot hullámfüggvényére impulzus-reprezentációban a

$$\langle p'_x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{2\pi\hbar} C(p_x)\langle p'_x|p_x\rangle \tag{3.3.12}$$

alak adódik. Az általánosított ortonormáltsági relációt

$$\langle p'_x|p_x\rangle = 2\pi\hbar\delta(p_x - p'_x) \tag{3.3.13}$$

alakban felhasználva, a hullámfüggvény impulzus-reprezentációban:

$$\langle p'_x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp_x C(p_x)\delta(p_x - p'_x) = C(p'_x). \tag{3.3.14}$$

A $|\psi\rangle$ állapot $\psi(x)$ koordináta-hullámfüggvényének impulzus-sajátfüggvények szerinti kifejtési együtthatói tehát a $|\psi\rangle$ állapot impulzus-reprezentációbeli hullámfüggvényét jelentik. Az $F = x$-ábrázolásból a $G = p_x$ ábrázolásba történő transzformáció mátrixa

$$\langle p_x|x\rangle = \langle x|p_x\rangle^* = \psi^*_{p_x}(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}p_x x}. \tag{3.3.15}$$

A koordináta-hullámfüggvény és az impulzus-hullámfüggvény egymásnak Fourier-transzformáltjai.

A 3-dimenziós térben az impulzus Descartes-komponenseihez egymással páronként kommutáló operátorok tartoznak, azért ezeknek van közös sajátfüggvény-rendszere. Ezért az egyes impulzus-komponensekre vonatkozó sajátérték-egyenletek

$$\hat{\vec{p}}\psi_{\vec{p}'}(\vec{r}) = \vec{p}'\psi_{\vec{p}'}(\vec{r}) \tag{3.3.16}$$

vektoralakban foglalhatók össze. A megoldásaik pedig a

$$\psi_{\vec{p}'}(\vec{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\vec{r}} \tag{3.3.17}$$

impulzus-sajátfüggvények. Ezek a térben periodikusak, $\vec{k} = \vec{p}'/\hbar$ hullámvektorral jellemezhetők. Az $i = x, y, z$ irányokban a hullámhossz rendre

$$\lambda_i = \frac{2\pi}{k_i} = \frac{h}{p'_i}, \tag{3.3.18}$$

ami a de Broglie-féle hullámhossz. Az impulzus-sajátüggvények nem négyzetesen integrálhatóak, mert abszolút értékük négyzete,

$$|\psi_{\vec{p}'}(\vec{r})|^2 = 1, \tag{3.3.19}$$

helytől független állandó. Ezért ezek nem fizikai állapotok hullámfüggvényei. Ha azok lennének, az azt jelentené, hogy az általuk leírt részecske a térben mindenütt azonos valószínűséggel lenne jelen. A részecskét nem lehet olyan állapotban előállítani, amelyben az impulzusa élesen meghatározott. A határozatlansági reláció elvi korlátot jelent ebben. A valóságos részecskék, amelyeket a gyorsítók előállítanak, sosincsenek impulzus-sajátállapotban. A legjobb, ami előfordulhat, hogy olyan hullámcsomagok,

amelyekben egy adott impulzus-sajátfüggvény fordul elő a legnagyobb amplitudóval. Erre még visszatérünk, amikor a hullámcsomagokról fogunk beszélni.

Az impulzus-sajátfüggvények teljesítik az általánosított ortonormáltsági relációt,

$$\int d\vec{r}\psi_{\vec{p}''}(\vec{r})\psi_{\vec{p}'}(\vec{r}) = (2\pi\hbar)^3\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}'), \tag{3.3.20}$$

és a teljességi relációt,

$$\psi(\vec{r}) = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}C(\vec{p})\psi_{\vec{p}}(\vec{r}), \quad C(\vec{p}) = \langle\vec{p}|\psi\rangle = \int d\vec{r}e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}\psi(\vec{r}). \tag{3.3.21}$$

Ebből látjuk, hogy a koordináta-hullámfüggvény és az impulzus-hullámfüggvény egymásnak Fourier-transzformáltjai.

3.3.4. Az impulzusoperátor jelentése

A helyzetvektor-operátor és az impulzus-operátor koordináta-hullámfüggvényekre az

$$\hat{\vec{r}} = \vec{r} \quad \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \tag{3.3.1}$$

differenciál-operátor alakjában hat. A helyzetvektor és az impulzus Descartes-komponenseinek megfeleltetett fenti differenciál-operátorok kielégítik a Heisenberg-féle csererelációkat,

$$[\hat{x}_j, \hat{x}_k] = [\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0, \qquad [\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{j,k}, \quad (j,k = x,y,z). \tag{3.3.2}$$

Legyen a részecske hullámfüggvénye $\psi(\vec{r})$. Képezzük azt a függvényt, amit az $\frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot\hat{\vec{p}} = \frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{3} a_j\hat{p}_j$ operátor állít elő a tetszőleges $\psi(\vec{r})$ hullámfüggvényből; a_j $(j = 1,2,3)$ infinitezimális valós paraméterek, az $\vec{a}$ infinitezimális, 3-dimenziós térbeli vektor Descartes-komponensei. Ekkor

$$\begin{aligned}\frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot\hat{\vec{p}}\psi(\vec{r}) &= \vec{a}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\psi(\vec{r}) \\ &= \psi(\vec{r}+\vec{a}) - \psi(\vec{r}) + \mathcal{O}(a^2),\end{aligned} \tag{3.3.3}$$

Az $\frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot\hat{\vec{p}}$ operátor hatása tehát a koordináta-hullámfüggvényre olyan, hogy annak azt a megváltozását állítja elő, ami a koordinátarendszer infinitezimális $-\vec{a}$ vektorral történő eltolása során következik be. Az impulzus operátora tehát a vonatkoztatási rendszer önmagával párhuzamos eltolását generálja.

Következő lépésben megmutatjuk, hogy **ha a fizikai rendszernek a térbeli eltolás szimmetriája, akkor az impulzus várható értéke megmarad.**

Ha a fizikai rendszernek a térbeli eltolás szimmetriája, akkor a fizikai állítások nem függhetnek attól, hogy mi melyik koordinátarendszert választjuk, a K-t vagy a hozzá képest párhuzamosan eltolt K'-t. Ezért egyrészt a rendszer Hamilton-operátora nem változik meg térbeli eltolások során: $\hat{H} = \hat{H}'$, ahol $\hat{H}$, ill. $\hat{H}'$ a rendszer Hamilton-operátora rendre a K , ill. a K' vonatkoztatási rendszerben. Másrészt a térben eltolt K' rendszerben minden átmeneti amplitudónak meg kell egyeznie az eredeti K rendszerbeli átmeneti amplitudókkal, úgyhogy

$$\langle\phi|\hat{H}|\psi\rangle = \langle\phi'|\hat{H}'|\psi'\rangle \tag{3.3.4}$$

azonosságnak kell teljesülnie tetszőleges $|\phi\rangle$ és $|\psi\rangle$ állapotvektorokra, ahol

$$\begin{aligned} |\phi'\rangle &= |\phi\rangle + \frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot\hat{\vec{p}}|\phi\rangle, \\ |\psi'\rangle &= |\psi\rangle + \frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot\hat{\vec{p}}|\psi\rangle, \end{aligned} \tag{3.3.5}$$

rendre a megfelelő állapotvektorok az infinitezimálisan eltolt K' koordinátarendszerben. Innen a Hamilton-operátor transzformációja infinitezimális eltolás során

$$\hat{H} - \hat{H}' = \frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot[\hat{\vec{p}}, \hat{H}] \tag{3.3.6}$$

alakban adódik. Eltolási szimmetria esetén a bal oldalon nulla áll, azaz azt kapjuk, hogy

$$[\hat{\vec{p}}, \hat{H}] = 0. \tag{3.3.7}$$

Ha tehát a pontrészecske (mint fizikai rendszer) a térbeli eltolásokkal szemben invariáns, akkor az impulzusának az operátora felcserélhető a Hamilton-operátorral, ami - időtől explicit módon nem függő operátorról lévén szó - azt jelenti, hogy az impulzus megmarad. Ezzel beláttuk, hogy a Heisenberg-féle csererelációk kielégítése útján értelmezett impulzus-operátor olyan, vektorjellegű fizikai mennyiség operátora, amely a térbeli eltolási szimmetria következtében marad meg. Joggal nevezzük tehát ezt az operátort az impulzus operátorának.

3.4. A koordináta-hullámfüggvény valószínűségi jelentése

A Schrödinger-egyenlet alapján könnyen meggyőződhetünk a koordináta-hullámfüggvény valószínűségi jelentéséről[22]: **a találati valószínűségre kontinuitási egyenletet írhatunk fel.**

Didaktikai okokból először egyetlen részecske esetén vezetjük le a kontinuitási egyenletet.Ehhez írjuk fel egymás után a hullámfüggvényre vonatkozó Schrödinger-egyenletet és annak komplex konjugáltját:

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi &= \hat{H}\psi, \\ -i\hbar\partial_t\psi^* &= \hat{H}^*\psi^*. \end{aligned} \tag{3.4.1}$$

[22]Max Bornnak (1882-1970, német) ítélték oda felerészben az 1954. évi fizikai Nobel-díjat a kvantummechanikában végzett alapvető jelentőségű kutatásaiért, különös tekintettel a hullámfüggvény általa adott statisztikus interpretációjára. A díj másik részében Walther Bothe (1891-1957, német) részesült az általa kifejlesztett koincidencia-módszerért és azokért a felfedezésekért, amelyeket evvel a módszerrel tett.

Szorozzuk meg az első egyenlet mindkét oldalát balról ψ^*-gal, a másodikét pedig ψ-vel, majd integráljunk a tér egy tetszőleges V térfogatú, zárt tartományára és vonjuk ki a második egyenletet az elsőből:

$$i\hbar \int_V dV[\psi^*(\partial_t \psi) + (\partial_t \psi^*)\psi] = \int_V dV[\psi^* \hat{H}\psi - \psi \hat{H}^* \psi^*]. \tag{3.4.2}$$

Használjuk fel, hogy koordináta-reprezentációban

$$\hat{H} = \hat{H}^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}), \tag{3.4.3}$$

ekkor az egyenlet jobb oldala

$$\begin{aligned} &-\frac{\hbar^2}{2m}\int_V dV[\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_V dV[\vec{\nabla}\cdot(\psi^*\vec{\nabla}\psi) - (\vec{\nabla}\psi^*)\cdot(\vec{\nabla}\psi) - \vec{\nabla}\cdot(\psi\vec{\nabla}\psi^*) + (\vec{\nabla}\psi)\cdot(\vec{\nabla}\psi^*)] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_V dV\vec{\nabla}\cdot[\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*]. \end{aligned} \tag{3.4.4}$$

A következő egyenletet kapjuk tehát:

$$\frac{d}{dt}\int_V dV\psi^*\psi = \frac{i\hbar}{2m}\int_V dV \mathrm{div}\,[\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*]. \tag{3.4.5}$$

A Gauss-tétel értelmében tehát az egyenlet jobb oldala átírható a szögletes zárójelben található vektormezőnek a tetszőleges V térfogatot határoló F felületre vett integráljává. Azt kapjuk tehát, hogy

$$\frac{d}{dt}\int_V dV\psi^*\psi = \frac{i\hbar}{2m}\int_F dF\vec{n}\cdot[\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*], \tag{3.4.6}$$

ahol $\vec{n}$ a tetszőleges V térfogatot határoló F felület külső normálisa, $\vec{n}\cdot\vec{n} = 1$. Innen az alábbiakat állapíthatjuk meg:

1. Mivel az egyenlet integrális alakja tetszőleges V térfogatra igaz, ezért belőle következik az alábbi parciális differenciálegyenlet:

   $$\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\psi - \frac{i\hbar}{2m}\mathrm{div}\,[\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*] = 0. \tag{3.4.7}$$

   Ez az egyenlet kontinuitási egyenlet, valaminek a lokális megmaradását fejezi ki, aminek a sűrűsége $\rho = \psi^*\psi$, az áramsűrűsége pedig $\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}[\psi\vec{\nabla}\psi^* - \psi^*\vec{\nabla}\psi]$. A kontinuitási egyenlet differenciális alakja:

   $$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}\,\vec{j} = 0. \tag{3.4.8}$$

   Formailag ugyanilyen kontinuitási egyenlet fejezi ki a klasszikus elektrodinamikában a töltések lokális megtmaradását.

2. Ha V a teljes (végtelen) tér térfogata, akkor - az időfejlesztő operátor unitaritása miatt - a bal oldalon az állapot időtől független, 1-gyel egyenlő normájának az idő szerinti deriváltja, azaz nulla áll.

3. **A ρ skalár mező teljes térfogatra vett integrálja tehát 1,**

$$\int dV \psi^* \psi = 1, \tag{3.4.9}$$

és értéke nem negatív a tér tetszőleges pontjában, tetszőleges időpillanatban

$$\rho = \psi^* \psi = |\psi|^2 \geq 0. \tag{3.4.10}$$

Mindezek lehetővé teszik a koordináta-hullámfüggvény valószínűségi értelmezését. Annak a valószínűsége, hogy a részecskét az $\vec{r}$ helyzetvektorú térbeli pont körüli dV térfogatelemben megtaláljuk $\rho(\vec{r}, t)dV = |\psi|^2 dV$. A megtalálási valószínűségre kontinuitási egyenlet érvényes. Adott térfogatban csak azért csökkenhet ill. nőhet a részecske megtalálási valószínűsége, mert annak felületén a találati valószínűség ,,ki- ill. beáramlik". A részecske tehát nem semmisülhet meg, és nem is keletkezhet, hanem csak a tér különböző pontjaiban való megtalálásának valószínűsége változhat meg a kontinuitási egyenletnek megfelelő módon.

A normálható, azaz fizikai állapotokban a térbeli végtelenben a részecske hullámfüggvénye is és deriváltjai is eltűnnek, úgyhogy ott a találati valószínűség és a valószínűségi áramsűrűség is eltűnik.

3.5. A pályaimpulzusmomentum

3.5.1. Pontrészecske pályaimpulzusmomentum-operátorának definíciója

Az $\vec{r}$ helyzetvektorú pontban található, $\vec{p}$ impulzusú pontrészecske pályaimpulzusmomentuma a klasszikus mechanikában $\vec{\ell} = \vec{r} \times \vec{p}$. Ennek mintájára **a kvantummechanikai részecske pályaimpulzusmomentumának operátorát**

$$\hat{\vec{\ell}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \tag{3.5.1}$$

alakban értelmezzük. A helyzetvektor és az impulzus Descartes-komponenseire vonatkozó Heisenberg-féle csererelációkból következik, hogy **a pályaimpulzusmomentum Descartes-komponenseinek operátorai az alábbi csererelációkat elégítik ki:**

$$[\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y] = i\hbar\hat{\ell}_z, \qquad [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_x] = i\hbar\hat{\ell}_y, \qquad [\hat{\ell}_y, \hat{\ell}_z] = i\hbar\hat{\ell}_x. \tag{3.5.2}$$

Ezeket összefoglalva

$$[\hat{\ell}_j, \hat{\ell}_k] = i\hbar \sum_{l=1}^{3} \epsilon_{j,k,l} \hat{\ell}_l \tag{3.5.3}$$

alakban írhatjuk, ahol

$$\epsilon_{j,k,l} = \begin{cases} +1, & \text{ha} \quad (j,k,l) = (1,2,3),(2,3,1),(3,1,2) \\ -1, & \text{ha} \quad (j,k,l) = (3,2,1),(2,1,3),(1,3,2) \\ 0, & \text{egyébként} \end{cases} . \tag{3.5.4}$$

A csererelációk

$$\begin{aligned}
\left[\hat{\ell}_j, \hat{\ell}_k\right] &= \sum_{j',j'',k',k''=1}^{3} \left[\epsilon_{j,j',j''}\hat{x}_{j'}\hat{p}_{j''}, \epsilon_{k,k',k''}\hat{x}_{k'}\hat{p}_{k''}\right] \\
&= \sum_{j',j'',k',k''=1}^{3} \epsilon_{j,j',j''}\epsilon_{k,k',k''}\left[\hat{x}_{j'}\hat{p}_{j''}\hat{x}_{k'}\hat{p}_{k''} - \hat{x}_{k'}\hat{p}_{k''}\hat{x}_{j'}\hat{p}_{j''}\right] \\
&= \sum_{j',j'',k',k''=1}^{3} \epsilon_{j,j',j''}\epsilon_{k,k',k''}[\hat{x}_{j'}(\hat{x}_{k'}\hat{p}_{j''} - i\hbar\delta_{k',j''})\hat{p}_{k''} - \hat{x}_{k'}(\hat{x}_{j'}\hat{p}_{k''} - i\hbar\delta_{j',k''})\hat{p}_{j''}] \\
&= -i\hbar \sum_{j',k',k''=1}^{3} \epsilon_{j,j',k'}\epsilon_{k'',k,k'}\hat{x}_{j'}\hat{p}_{k''} + i\hbar \sum_{j',j'',k'=1}^{3} \epsilon_{j'',j,j'}\epsilon_{k,k',j'}\hat{x}_{k'}\hat{p}_{j''} \\
&= -i\hbar \sum_{j',k''=1}^{3} (\delta_{j,k''}\delta_{j',k} - \delta_{j,k}\delta_{k'',j'})\hat{x}_{j'}\hat{p}_{k''} + i\hbar \sum_{j'',k'=1}^{3} (\delta_{j'',k}\delta_{j,k'} - \delta_{j'',k'}\delta_{k,j})\hat{x}_{k'}\hat{p}_{j''} \\
&= i\hbar[-\hat{x}_k\hat{p}_j + \hat{x}_j\hat{p}_k] + i\hbar\delta_{j,k}\left[\sum_{j'}^{3} \hat{x}_{j'}\hat{p}_{j'} - \sum_{k'=1}^{3} \hat{x}_{k'}\hat{p}_{k'}\right] \\
&= i\hbar[\hat{x}_j\hat{p}_k - \hat{x}_k\hat{p}_j] = i\hbar\epsilon_{j,k,l}\hat{\ell}_l.
\end{aligned} \tag{3.5.5}$$

A koordináta-reprezentációban az impulzusmomentum Descartes-komponenseinek az alábbi operátorok felelnek meg:

$$\hat{\ell}_x = \frac{\hbar}{i}(y\partial_z - z\partial_y), \qquad \hat{\ell}_y = \frac{\hbar}{i}(z\partial_x - x\partial_z), \qquad \hat{\ell}_z = \frac{\hbar}{i}(x\partial_y - y\partial_x), \tag{3.5.6}$$

amit tömörebben

$$\hat{\vec{\ell}} = \frac{\hbar}{i}\vec{r} \times \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \tag{3.5.7}$$

alakban is írhatunk.

3.5.2. Pontrészecske pályaimpulzusmomentum-operátorának jelentése

Megmutatjuk, hogy **a pályaimpulzusmomentum operátora a vonatkoztatási rendszer infinitezimális elforgatásait generálja.**

Vizsgáljuk meg a pályaimpulzusmomentum operátorának a hatását a koordináta-hullámfüggvényre. Legyenek $\delta\varphi_j$ infinitezimális paraméterek és képezzük az $\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{3}\delta\varphi_j\hat{\ell}_j$ operátort. Ez a koordináta-

hullámfüggvényre hatva a

$$\begin{aligned}
\delta\psi(\vec{r}) &\equiv \frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{3}\delta\varphi_j\hat{\ell}_j\psi(\vec{r}) \\
&= \delta\vec{\varphi}\cdot\left(\vec{r}\times\frac{\partial\psi(\vec{r})}{\partial\vec{r}}\right) \\
&= \frac{\partial\psi(\vec{r})}{\partial\vec{r}}\cdot(\delta\vec{\varphi}\times\vec{r}) \\
&= \psi(\vec{r}+\delta\vec{\varphi}\times\vec{r})-\psi(\vec{r})+\mathcal{O}((\delta\varphi)^2) \\
&= \psi(\vec{r}+\delta\vec{r})-\psi(\vec{r})+\mathcal{O}((\delta\varphi)^2)
\end{aligned} \tag{3.5.8}$$

függvényt eredményezi, ami úgy fogható fel, mint a hullámfüggvény infinitezimális megváltozása, ha a $\delta\vec{\varphi}=(\delta\varphi_x,\delta\varphi_y,\delta\varphi_z)=\vec{n}\delta\varphi$ vektor irányába mutató $\vec{n}$ egységvektor körül infinitezimális $\delta\varphi=\sqrt{\sum_{j=1}^{3}\delta\varphi_j^2}$ szöggel elforgatjuk a vonatkoztatási rendszert. Az impulzusmomentum $\hat{\vec{\ell}}$ operátora tehát a hullámfüggvény megváltozását generálja infinitezimális elforgatások során.

3.5.3. Pontrészecske pályaimpulzusmomentumának megmaradása

Megmutatjuk, hogy **ha az egy-részecskés fizikai rendszer térbeli elforgatási szimmetriával rendelkezik, akkor a pályaimpulzusmomentuma megmarad[23].**

Ha a fizikai rendszer invariáns a térbeli elforgatásokkal szemben, akkor a rendszer $\hat{H}$ Hamilton-operátora invariáns a koordináta-rendszer elforgatásaival szemben. Legyen $\hat{H}'$ a rendszer Hamilton-operátora az elforgatott K' koordináta-rendszerben. Tekintsünk csak infinitezimális elforgatásokat, amelyek egymás utáni alkalmazásaként tetszőleges véges elforgatás megkapható. Ahhoz, hogy $\hat{H}$ és $\hat{H}'$ ugyanazt a rendszert írja le, a két Hamilton-operátornak azonosnak kell lennie, $\hat{H}'=\hat{H}$. Fentebb megkaptuk, hogy a pályaimpulzusmomentum operátora határozza meg, hogyan transzformálódnak az állapotok koordináta-hullámfüggvényei a koordináta-rendszer infinitezimális elforgatáai során. Az operátoroknak (így a Hamilton-operátornak is) úgy kell transzformálódniuk, hogy az összes átmeneti amplitudó azonos maradjon az eredeti és az elforgatott rendszerben. Tehát tetszőleges $|\psi\rangle$ és $|\phi\rangle$ állapotok esetén

$$\langle\phi|\hat{H}|\psi\rangle=\langle\phi'|\hat{H}'|\psi'\rangle \tag{3.5.9}$$

kell fennálljon, ahol a vessző jelöli az eredeti állapotok elforgatottjait:

$$|\psi'\rangle=|\psi\rangle+\frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\cdot\hat{\vec{\ell}}|\psi\rangle. \tag{3.5.10}$$

A (3.5.9) feltétel ezért az alábbi egyenletre vezet,

$$\hat{H}-\hat{H}'=-\frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\cdot\hat{\vec{\ell}}\hat{H}+\hat{H}\frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\cdot\hat{\vec{\ell}} \tag{3.5.11}$$

ami meghatározza a Hamilton-operátor megváltozását infinitezimális elforgatás során. A rendszer elforgatással szemben mutatott szimmetriája azt jelenti, hogy $\hat{H}=\hat{H}'$, azaz

$$[\hat{\vec{\ell}},\hat{H}]=0, \tag{3.5.12}$$

[23] Olyan pontrészecskéről van szó, amelynek a helyzetvektorán kívül, azaz a térbeli szabadsági fokain kívül nincsen semmilyen további, belső szabadsági foka. Többek között zérus a spinje.

azaz **forgásszimmetrikus, egyetlen (zérus spinű) részecskéből álló rendszer Hamilton-operátora felcserélhető a részecske pályaimpulzusmomentumának az operátorával**[24]**.** Mivel a pályaimpulzusmomentum operátora nem függ explicit módon az időtől[25], a

$$[\hat{\ell}_j, \hat{H}] = 0, \quad j = 1, 2, 3 \tag{3.5.13}$$

kommutátorok eltűnése azt jelenti, hogy **forgásszimmetrikus, egyetlen pontrészecskét tartalmazó rendszerben a pályaimpulzusmomentum megmarad.**

Abból következően, hogy a pályaimpulzusmomentum 3 Descartes-komponense között nincs 2 olyan, amelyik felcserélhető lenne, ezért a **pályaimpulzusmomentumnak legfeljebb csak egyik vetülete rendelkezhet jól definiált értékkel,** akár megmarad a pályaimpulzusmomentum, akár nem. Azt szoktuk mondani, hogy a pályaimpulzusmomentum tetszőlegesen választott z-tengelyre vett vetületének $\hat{\ell}_z$ operátora rendelkezhet csak jól definiált értékkel, veheti fel pontosan valamelyik sajátértékét.

3.5.4. A pályaimpulzusmomentum négyzete

Könnyen észrevehetjük a definíció és a csererelációk alapján, hogy **a pályaimpulzusmomentum négyzete,**

$$\hat{\boldsymbol{\ell}}^{\,2} \equiv \hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 + \hat{\ell}_z^2 \tag{3.5.14}$$

felcserélhető az impulzusmomentum valamennyi komponensével:

$$[\hat{\boldsymbol{\ell}}^{\,2}, \hat{\ell}_i] = 0, \quad i = x, y, z. \tag{3.5.15}$$

Képezzük az alábbi kommutátorokat:

$$\begin{aligned}
[\hat{\ell}_j, \hat{\ell}_k^2] &= \hat{\ell}_j \hat{\ell}_k^2 - \hat{\ell}_k^2 \hat{\ell}_j \\
&= \hat{\ell}_j \hat{\ell}_k^2 - \hat{\ell}_k (i\hbar \sum_l \epsilon_{k,j,l} \hat{\ell}_l + \hat{\ell}_j \hat{\ell}_k) \\
&= -i\hbar \sum_l \epsilon_{k,j,l} \hat{\ell}_k \hat{\ell}_l + \hat{\ell}_j \hat{\ell}_k^2 - (i\hbar \sum_l \epsilon_{k,j,l} \hat{\ell}_l \hat{\ell}_k + \hat{\ell}_j \hat{\ell}_k^2) \\
&= -i\hbar \sum_l \epsilon_{k,j,l} (\hat{\ell}_k \hat{\ell}_l + \hat{\ell}_l \hat{\ell}_k),
\end{aligned} \tag{3.5.16}$$

majd összegezzük azokat $k = 1, 2, 3$-ra:

$$\begin{aligned}
[\hat{\ell}_j, \hat{\boldsymbol{\ell}}^{\,2}] &= [\hat{\ell}_j, \sum_{k=1}^{3} \hat{\ell}_k^2] = \\
&= -i\hbar \sum_{k,l=1}^{3} \epsilon_{k,j,l} (\hat{\ell}_k \hat{\ell}_l + \hat{\ell}_l \hat{\ell}_k) = -i\hbar \sum_{k,l=1}^{3} \epsilon_{k,j,l} (\hat{\ell}_k \hat{\ell}_l - \hat{\ell}_k \hat{\ell}_l) = 0.
\end{aligned} \tag{3.5.17}$$

[24] Az ilyen rendszer vagy a szabad pontrészecske, vagy forgásszimmetrikus külső térben mozgó pontrészecske

[25] Sem a pályaimpulzusmomentum, sem a Hamilton-operátor nem függ explicit módon az időtől, ha a forgásszimmetrikus külső tér nem függ az időtől.

Ezzel beláttuk, amit akartunk.

Ha az egyetlen pontrészecskéből álló rendszer forgásszimmetrikus, akkor a Hamilton-operátor az impulzusmomentum négyzetének operátorával is felcserélhető:

$$[\hat{l}^{\,2}, \hat{H}] = 0. \tag{3.5.18}$$

Ez nyilvánvaló, hiszen forgásszimmetria esetén a Hamilton-operátor felcserélhető a pályaimpulzusmomentum bármelyik Descartes-komponensének operátorával, úgyhogy akkor az azok kifejezéseként megalkotott impulzusmomentum négyzetének operátorával is felcserélhető.

3.5.5. A pályaimpulzusmomentum léptető operátorai

Értelmezzük a későbbiekben hasznosnak bizonyuló ún. **léptető operátorokat:**

$$\hat{\ell}_{\pm} = \hat{\ell}_x \pm i\hat{\ell}_y. \tag{3.5.19}$$

Nyilvánvaló, hogy amíg az impulzusmomentum Descartes-komponensei önadjungált operátorok, addig a léptető operátorok nem azok, hiszen adjungálás során ezek éppen egymásba transzformálódnak:

$$\hat{\ell}_{\pm}^{\dagger} = \hat{\ell}_{\mp}. \tag{3.5.20}$$

Az impulzusmomentum Descartes-komponenseinek operátoraira vonatkozó csere-relációkat felhasználva könnyen beláthatjuk, hogy

$$[\hat{\ell}_+, \hat{\ell}_-] = 2\hbar\hat{\ell}_z, \qquad [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_+] = \hbar\hat{\ell}_+, \qquad [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_-] = -\hbar\hat{\ell}_-, \tag{3.5.21}$$

Ugyancsak egyszerűen beláthatjuk a következő azonosságot:

$$\hat{\vec{\ell}}^{\,2} = \hat{\ell}_+\hat{\ell}_- + \hat{\ell}_z^2 - \hbar\hat{\ell}_z = \hat{\ell}_-\hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_z^2 + \hbar\hat{\ell}_z. \tag{3.5.22}$$

A fentiekből az is következik, hogy a léptető operátorok felcserélhetők a pályaimpulzusmomentum négyzetének operátorával:

$$[\hat{\vec{\ell}}^{\,2}, \hat{\ell}_{\pm}] = 0. \tag{3.5.23}$$

3.5.6. A pályaimpulzusmomentum operátora gömbi polárkoordináta-rendszerben

Ha bevezetjük a részecske helyzetének jellemzésére a gömbi polárkoordinátákat a szokásos

$$x = r\sin\theta\ \cos\varphi, \qquad y = r\sin\theta\ \sin\varphi, \qquad z = r\cos\theta \tag{3.5.24}$$

összefüggésekkel, ahol $r \in [0, \infty)$, $\theta \in [0, \pi]$ és $\varphi \in [0, 2\pi]$, akkor **a pályaimpulzusmomentum Descartes-komponenseinek operátorai kifejezhetők a gömbi polárkoordináták**

segítségével:

$$\hat{\ell}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi},$$
$$\hat{\ell}_\pm = \hbar e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\text{ctg }\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right). \tag{3.5.25}$$

Az impulzusmomentum négyzetének operátorára ekkor

$$\hat{\ell}^{\,2} = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right] \equiv -\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi} \tag{3.5.26}$$

adódik. A későbbiek szempontjából fontos nagyon jól megjegyezni, hogy ez az operátor a $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ Laplace[26]-operátor szögfüggő része:

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\hat{\ell}^{\,2}. \tag{3.5.27}$$

A gömbi polárkoordináták és a Descartes-koordináták közti kapcsolat alapján

$$\begin{aligned}
\partial_r &= \sin\theta\cos\varphi\partial_x + \sin\theta\sin\varphi\partial_y + \cos\theta\partial_z,\\
\partial_\theta &= r\cos\theta\cos\varphi\partial_x + r\cos\theta\sin\varphi\partial_y - r\sin\theta\partial_z,\\
\partial_\varphi &= -r\sin\theta\sin\varphi\partial_x + r\sin\theta\cos\varphi\partial_y\\
&= -y\partial_x + x\partial_y
\end{aligned} \tag{3.5.28}$$

Innen rögtön adódik, hogy

$$\frac{\hbar}{i}\partial_\varphi = -y\hat{p}_x + x\hat{p}_y = \hat{\ell}_z, \tag{3.5.29}$$

továbbá, hogy

$$\begin{aligned}
\hbar e^{\pm i\varphi}\left(\pm\partial_\theta + i\text{ctg }\theta\partial_\varphi\right) &= \hbar e^{\pm i\varphi}[\pm(r\cos\theta\cos\varphi\partial_x + r\cos\theta\sin\varphi\partial_y - r\sin\theta\partial_z)\\
&\quad + i\text{ctg }\theta(-r\sin\theta\sin\varphi\partial_x + r\sin\theta\cos\varphi\partial_y)]\\
&= \hbar e^{\pm i\varphi}\{r\cos\theta[(\pm\cos\varphi - i\sin\varphi)\partial_x + (\pm\sin\varphi + i\cos\varphi)\partial_y] \mp r\sin\theta\partial_z\}\\
&= \hbar e^{\pm i\varphi}\{r\cos\theta[\pm e^{\mp i\varphi}\partial_x + ie^{\mp i\varphi}\partial_y] \mp r\sin\theta\partial_z\}\\
&= \hbar\{r\cos\theta[\pm\partial_x + i\partial_y] \mp re^{\pm i\varphi}\sin\theta\partial_z\}\\
&= \hbar\{r\cos\theta[\pm\partial_x + i\partial_y] \mp r(\cos\varphi \pm i\sin\varphi)\sin\theta\partial_z\}\\
&= \hbar\{z(\pm\partial_x + i\partial_y) \mp x\partial_z - iy\partial_z\}\\
&= \frac{\hbar}{i}[i(\pm z\partial_x \mp x\partial_z) - (z\partial_y - y\partial_z)]\\
&= \frac{\hbar}{i}[\pm i(z\partial_x - x\partial_z) + (y\partial_z - z\partial_y)]\\
&= \hat{\ell}_x \pm i\hat{\ell}_y = \hat{\ell}_\pm.
\end{aligned} \tag{3.5.30}$$

[26]Pierre-Simon Laplace (1749-1827, francia) matematikus és fizikus, tudományos munkássága elsősorban a Naprendszer keletkezésére, az égi mechanikára, továbbá valószínűségszámítási és statisztikai vizsgálatokra irányult. Felfedezte a gravitációs potenciált (bár nem nevezte ezen a néven), és észrevette, hogy az a később róla elnevezett Laplace-egyenletnek tesz eleget.

Az pályaimpulzusmomentum négyzete operátorának gömbi polárkoordinátás alkját a fentieket felhasználva az

$$\hat{\ell}^2 = \hat{\ell}_+\hat{\ell}_- + \hat{\ell}_z^2 - \hbar\hat{\ell}_z \tag{3.5.31}$$

azonosság alapján kapjuk meg:

$$\begin{aligned}
\hat{\ell}^2 &= \hbar^2 e^{i\varphi}\Big(\partial_\theta + i\mathrm{ctg}\,\theta\partial_\varphi\Big)\Big[e^{-i\varphi}\Big(-\partial_\theta + i\mathrm{ctg}\,\theta\partial_\varphi\Big)\Big] - \hbar^2\partial_\varphi^2 + \hbar^2 i\partial_\varphi \\
&= \hbar^2\Big\{\Big(-\partial_\theta{}^2 - i\frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\varphi + i\mathrm{ctg}\,\theta\partial_\theta\partial_\varphi\Big) + ie^{i\varphi}\mathrm{ctg}\,\theta\partial_\varphi\Big[e^{-i\varphi}\Big(-\partial_\theta + i\mathrm{ctg}\,\theta\partial_\varphi\Big)\Big] - \partial_\varphi^2 + i\partial_\varphi\Big\} \\
&= \hbar^2\Big\{\Big(-\partial_\theta{}^2 - i\frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\varphi + i\mathrm{ctg}\,\theta\partial_\theta\partial_\varphi\Big) + i\mathrm{ctg}\,\theta\Big[-i\Big(-\partial_\theta + i\mathrm{ctg}\,\theta\partial_\varphi\Big)\Big] \\
&\quad + i\mathrm{ctg}\,\theta\Big(-\partial_\theta\partial_\varphi + i\mathrm{ctg}\,\theta\partial_\varphi{}^2\Big) - \partial_\varphi^2 + i\partial_\varphi\Big\} \\
&= \hbar^2\Big\{-\partial_\theta^2 - \mathrm{ctg}\,\theta\partial_\theta - \frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\varphi^2 + \frac{\cos^2\theta + \sin^2\theta - 1}{\sin^2\theta}\partial_\varphi\Big\} \\
&= -\hbar^2\Big[\frac{1}{\sin\theta}\Big(\sin\theta\partial_\theta^2 + \cos\theta\partial_\theta\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\varphi^2\Big] \\
&= -\hbar^2\Big[\frac{1}{\sin\theta}\partial_\theta\Big(\sin\theta\partial_\theta\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\varphi^2\Big]
\end{aligned} \tag{3.5.32}$$

3.5.7. A pályaimpulzusmomentum operátorának sajátfüggvényei és sajátértékei

A fentiekben kiderült, hogy **a pályaimpulzusmomentum komponenseinek operátorai nem cserélhetők fel egymással,**

$$[\hat{\ell}_j, \hat{\ell}_k] = i\hbar\epsilon_{j,k,l}\hat{\ell}_l, \tag{3.5.33}$$

de bármelyikük felcserélhető a pályaimpulzusmomentum négyzetének operátorával,

$$[\hat{\ell}_j, \hat{\ell}^2] = 0. \tag{3.5.34}$$

Ebből következik, hogy **egyidejűleg nem mérhető a pályaimpulzusmomentum valamennyi komponense, hanem legfeljebb csak az egyik komponense és a négyzete.** Válasszuk a z-tengelyt abban az irányban, amelyik irányú komponensét mérjük az impulzusmomentumnak. **Az $\hat{\ell}_z$ és az $\hat{\ell}^2$ operátorok egyidejűleg mérhetők, mivel ezek egymással felcserélhetők. Ez azonban azt is jelenti, hogy van közös sajátfüggvényrendszerük.** Keressük meg az impulzusmomentum-sajátállapotoknak ezt a rendszerét.

Használjunk gömbi polárkoordinátákat. Ekkor a keresett $\psi(\vec{r}) = f(r,\theta,\varphi)$ sajátfüggvények kielégítik az alábbi sajátérték-egyenleteket:

$$-i\hbar\partial_\varphi f(r,\theta,\varphi) = \ell_z f(r,\theta,\varphi), \tag{3.5.35}$$

$$-\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi} f(r,\theta,\varphi) = C f(r,\theta,\varphi), \tag{3.5.36}$$

ahol az egyelőre még nem ismert sajátértékeket ℓ_z és C jelöli.

Az első megállapításunk, hogy ezek a sajátértékegyenletek nem mondanak semmit arról, hogy a hullámfüggvény hogyan függ az r radiális koordinátától, hiszen a pályaimpulzusmomentum operátorai nem hatnak a radiális koordináta függvényeire. Ezért a sajátfüggvényekről a radiális koordinátától való függés leválasztható: az összes $f(r,\theta,\varphi) = R(r)Y(\theta,\varphi)$ alakú függvény kielégíti a sajátértékegyenleteket, ha a szögfüggő rész, $Y(\theta,\varphi)$ kielégíti azokat. Ekkor az (3.5.35) egyenlet

$$-i\hbar\partial_\varphi Y(\theta,\varphi) = \ell_z Y(\theta,\varphi) \tag{3.5.37}$$

alakot ölt. Keressük ennek megoldását szeparált,

$$Y(\theta,\varphi) = \Phi(\varphi)\Theta(\theta) \tag{3.5.38}$$

alakban. A φ-függő részre a

$$-i\hbar\frac{d}{d\varphi}\Phi(\varphi) = \ell_z\Phi(\varphi) \tag{3.5.39}$$

közönséges, lineáris, állandó együtthatós, elsőrendű differenciálegyenletet kapjuk. Ennek a megoldása, normálási együtthatótól eltekintve:

$$\Phi(\varphi) = e^{\frac{i}{\hbar}\ell_z\varphi}. \tag{3.5.40}$$

Vegyük azonban figyelembe, hogy a φ és a $\varphi + 2\pi$ szögű elforgatás egyenértékű, pl. a helyzetvektor a φ és a $\varphi + 2\pi$ szögű elforgatás után ugyanabba a helyzetvektorba transzformálódik[27]. Ezért a $\Phi(\varphi)$ hullámfüggvénynek 2π szerint periodikusnak kell lennie, egyébként nem lenne egyértékű. Az egyértékűség feltétele, hogy

$$\ell_z = m\hbar, \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{3.5.41}$$

legyen, mert az imaginárius argumentumú exponenciális függvény 2π szerint periodikus, $e^{ix} = e^{i(x+2m\pi)}$. **A pályaimpulzusmomentum vetületének sajátértékei tehát csak $\hbar$ egész számú többszörösei, $m\hbar$ lehetnek, a megfelelő sajátfüggvények pedig rendre:**

$$\Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}. \tag{3.5.42}$$

Mielőtt továbbmegyünk, hogy megkeressük az impulzusmomentum négyzetének sajátértékeit, vegyük észre, hogy ha találtunk olyan $\phi_{C,m}(\theta,\varphi) \Leftrightarrow |C,m\rangle$ állapotot, amely közös sajátállapota $\hat{\ell}_z$-nek és $\hat{\vec{\ell}}^{\,2}$-nek, azaz amelyre

$$\hat{\ell}_z|C,m\rangle = \hbar m|C,m\rangle, \qquad \hat{\vec{\ell}}^{\,2}|C,m\rangle = C|C,m\rangle, \tag{3.5.43}$$

[27]Valójában ebből nem következik, hogy a hullámfüggvény önmagába megy át, ezt szigorúan véve csak az átmeneti amplitudóktól kell megkövetelnünk. Ezért általánosan meg kellene engedni, hogy a hullámfüggvények tetszőleges $e^{i\alpha}$ komplex fázissal is szorzódhatnak 2π elforgatás során. Ez azonban azt jelentené, hogy a hullámfüggvény nem lenne egyértékű. Mélyebb szimmetriamegfontolásokból (csoportelméleti megfontolásokból) következik, hogy zérus spinű részecske esetén, amelyről hallgatólagosan ezidáig mindig szó volt, a hullámfüggvény csak egyértékű lehet.

akkor ebből az állapotból a léptető operátorok, mint az a csererelációkból azonnal következik, olyan állapotokat állítanak elő, amelyek a pályaimpulzusmomentum négyzetének ugyanehhez a C sajátértékéhez és a pályaimpulzusmomentum $\hat{\ell}_z$ vetületének $\hbar(m \pm 1)$ sajátértékéhez tartoznak:

$$\hat{\ell}_z(\hat{\ell}_\pm|C,m\rangle) = \hbar(m \pm 1)\hat{\ell}_\pm|C,m\rangle, \quad \hat{\ell}^{\,2}(\hat{\ell}_\pm|C,m\rangle) = C\hat{\ell}_\pm|C,m\rangle. \tag{3.5.44}$$

Azért nevezzük az $\hat{\ell}_\pm$ operátorokat léptető operátoroknak, mert ± 1-gyel léptetik a pályaimpulzusmomentum z-irányú vetületének a sajátértékét. Kérdés, hogy ez a léptetés a végtelenségig folytatható-e, vagy sem.

Vegyünk most a tetszőleges $m = \ell \geq 0$ sajátértékhez tartozó $e^{i\ell\varphi}$ sajátfüggvényt és kérdezzük, hogy megszorozva egy alkalmas $f(\theta)$ függvénnyel tudunk-e belőle olyan $\phi_+(\theta,\varphi)$ hullámfüggvényt készíteni, amely az (3.5.36) sajátértékegyenletet is kielégíti és amelyről nem lehet az impulzusmomentum vetületének sajátértékét felfelé léptetni. Keressük ezért az

$$\hat{\ell}_+|\phi_+\rangle = 0, \tag{3.5.45}$$

azaz a

$$\hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i \text{ ctg } \theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)f(\theta)e^{i\ell\varphi} = 0 \tag{3.5.46}$$

egyenlet megoldását. A φ szerinti deriválást elvégezve kapjuk, hogy

$$\frac{df(\theta)}{d\theta} = \ell f(\theta) \text{ ctg } \theta, \tag{3.5.47}$$

ahonnan, normálási tényezőtől eltekintve:

$$f(\theta) = \sin^\ell \theta. \tag{3.5.48}$$

Azt is könnyű belátni, hogy a kapott

$$\phi_+(\theta,\varphi) \propto e^{i\ell\varphi}\sin^\ell\theta \tag{3.5.49}$$

hullámfüggvény az impulzusmomentum négyzetének is sajátfüggvénye:

$$\hat{\ell}^{\,2}|\phi_+\rangle = (\hat{\ell}_-\hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_z^2 + \hbar\hat{\ell}_z)|\phi_+\rangle = \hbar^2\ell(\ell+1)|\phi_+\rangle, \tag{3.5.50}$$

mégpedig a

$$C = \hbar^2\ell(\ell+1) \tag{3.5.51}$$

sajátértékhez tartozik.**Az impulzusmomentum négyzetének $\ell \geq 0$ egész számmal jellemzett sajátértékéhez tartozó állapotok alterében tehát nem lehet az impulzusmomentum vetületének sajátértéke nagyobb, mint $m = \ell$.** Ugyanakkor, ebben az altérben a maximális $m = \ell$ értékhez tartozó $|\phi_+\rangle$ állapotból kiindulva az $\hat{\ell}^{\,2}$ és az $\hat{\ell}_z$ operátorok közös sajátfüggvényeit mind elő tudjuk állítani, ha

rendre egyszer, k'etszer, stb. hattatjuk rá a lefelé léptető $\hat{\ell}_-$ operátort. Vezessük be a szokásosabb jelölést, amikor a megfelelő sajátvektorokat az ℓ és m értékével jelöljük. Ekkor $|\phi_+\rangle = |\ell, \ell\rangle$ és

$$\begin{aligned}
&\hat{\ell}_+|\ell,\ell\rangle = 0, \qquad \hat{\ell}_z|\ell,\ell\rangle = \hbar\ell|\ell,\ell\rangle,\\
&\hat{\ell}_-|\ell,\ell\rangle \propto |\ell,\ell-1\rangle, \qquad \hat{\ell}_z|\ell,\ell-1\rangle = \hbar(\ell-1)|\ell,\ell-1\rangle,\\
&\vdots\\
&(\hat{\ell}_-)^{2\ell}|\ell,\ell\rangle \propto |\ell,-\ell\rangle, \qquad \hat{\ell}_z|\ell,-\ell\rangle = -\hbar\ell|\ell,-\ell\rangle.
\end{aligned} \tag{3.5.52}$$

Itt azonban észrevesszük, hogy olyan állapotot kaptunk, amelyre ismételten hattatva az $\hat{\ell}_-$ operátort, nullát kapunk.

Valóban, a maximális m értékhez tartozó sajátfüggvényre fennálló, koordináta-reprezentációban felírt

$$\hat{\ell}_+\phi_+(\theta,\varphi) = 0 \tag{3.5.53}$$

egyenlet komplex konjugáltja

$$0 = [\hat{\ell}_+\phi_+(\theta,\varphi)]^* = \hat{\ell}_+^*\phi_+^*(\theta,\varphi) = \hat{\ell}_-\phi_+^*(\theta,\varphi). \tag{3.5.54}$$

Itt azonban a $\phi_+^*(\theta,\varphi) \sim e^{-i\ell\varphi}\sin^\ell\theta$ hullámfüggvény szintén $\hat{\ell}^2$ és $\hat{\ell}_z$ közös sajátfüggvénye,

$$\begin{aligned}
\hat{\ell}_z\phi_+^*(\theta,\varphi) &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\phi_+^*(\theta,\varphi) = -\hbar\ell\phi_+^*(\theta,\varphi),\\
\hat{\ell}^2\phi_+^*(\theta,\varphi) &= [\hat{\ell}_+\hat{\ell}_- + \hat{\ell}_z^2 - \hbar\hat{\ell}_z]\phi_+^*(\theta,\varphi) = \hbar^2\ell(\ell+1)\phi_+^*(\theta,\varphi),
\end{aligned} \tag{3.5.55}$$

úgyhogy $\phi_+^*(\theta,\varphi)$ arányos kell legyen a $\langle\theta,\varphi|\ell,-\ell\rangle$ sajátfüggvénnyel. Ez viszont akkor azt jelenti, hogy az $\ell_z = -\hbar\ell$ sajátértéket nem lehet lefelé léptetni, azaz hogy

$$\hat{\ell}_-|\ell,-\ell\rangle = 0. \tag{3.5.56}$$

Azt kaptuk tehát, hogy az impulzusmomentum négyzete bármely $\ell \geq 0$ egész számmal jellemzett $C = \hbar^2\ell(\ell+1)$ sajátértékéhez az impulzusmomentum z komponensének $\hbar m = -\hbar\ell, -\hbar(\ell-1), \ldots, \hbar(\ell-1), \hbar\ell$ sajátértékei tartoznak. A megfelelő, 1-re normált sajátállapotok,

$$\langle\theta,\varphi|\ell,m\rangle = Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) \tag{3.5.57}$$

a gömbfelületi függvények, a keresett sajátfüggvények. A

$$\int_0^\pi d\theta\ \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y^\star_{\ell',m'}(\theta,\varphi)Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) = \delta_{\ell,\ell'}\delta_{m,m'} \tag{3.5.58}$$

ortonormáltsági relációt kielégítő gömbfelületi függvények

$$Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) = (-1)^{m+|m|}i^\ell\left[\frac{2\ell+1}{4\pi}\ \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}} P_\ell^{|m|}(\cos\theta)e^{im\varphi} \tag{3.5.59}$$

alakúak, ahol $P_\ell^m(\cos\theta)$ az úgynevezett asszociált (hozzárendelt) Legendre-polinomok[28] ($m = 0, 1, \ldots, \ell;\quad \ell = 0, 1, 2, \ldots$), amelyek a

$$P_\ell(\cos\theta) = \frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{d^\ell}{(d\cos\theta)^\ell}(\cos^2\theta - 1)^\ell \tag{3.5.60}$$

ℓ-edrendű Legendre-polinomokból a

$$P_\ell^m(\cos\theta) = \sin^m\theta\frac{d^m P_\ell(\cos\theta)}{(d\cos\theta)^m} \tag{3.5.61}$$

hozzárendeléssel állíthatók elő. Nyilvánvalóan $P_\ell^{m=0}(\cos\theta) = P_\ell(\cos\theta)$, azaz az $m = 0$-hoz tartozó asszociált Legendre-polinomok maguk az Legendre-polinomok.

A Legendre-polinomok a

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dP_\ell}{d\theta}\right) + \ell(\ell+1)P_\ell = 0 \tag{3.5.62}$$

differenciálegyenletet elégítik ki, az asszociált Legendre-polinomok pedig a

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dP_\ell^m}{d\theta}\right) + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]P_\ell^m = 0 \tag{3.5.63}$$

differenciálegyenlet megoldásai. A Legendre-polinomok ortonormáltak,

$$\int_{-1}^{1} d\mu P_{\ell'}(\mu)P_\ell(\mu) = \frac{2}{2\ell+1}\delta_{\ell',\ell} \tag{3.5.64}$$

relációt elégítik ki ($\mu = \cos\theta$). Az azonos m-hez tartozó asszociált Legendre-polinomok szintén kielégítenek egy ortonormáltsági relációt:

$$\int_{-1}^{1} d\mu P_{\ell'}^m(\mu)P_\ell^m(\mu) = \frac{2}{2\ell+1}\,\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}\delta_{\ell,\ell'}. \tag{3.5.65}$$

Az első néhány gömbfelületi függvény explicit alakja:

$$\begin{aligned}
&Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},\\
&Y_{1,0} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\quad Y_{1,\pm1} = \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\; e^{\pm i\varphi},\\
&Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(1-3\cos^2\theta),\quad Y_{2,\pm1} = \pm\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta\; e^{\pm i\varphi},\quad Y_{2,\pm2} = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\; e^{\pm 2i\varphi}.
\end{aligned} \tag{3.5.66}$$

A gömbfelületi függvények eleget tesznek az alábbi fontos tulajdonságnak

$$Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) = (-1)^{\ell-m}Y_{\ell,-m}(\theta,\varphi), \tag{3.5.67}$$

[28] Adrien-Marie Legendre (1752-1833, francia) matematikus, alapvető fontosságúak számelméleti munkái. Kidolgozta a legkisebb négyzetek módszerét, foglalkozott elliptikus integrálok meghatározásával, az euklideszi geometria alapjaival és módszereivel.

továbbá az $m = 0$ értékhez tartozó gömbfelületi függvények normálási tényezőtől eltekintve a megfelelő Legendre-polinomokkal azonosak:

$$Y_{\ell,0} = i^\ell \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell(\cos\theta). \tag{3.5.68}$$

Az eredmény a következőképpen foglalható össze: **A pályaimpulzusmomentum négyzetének lehetséges értékei $\hbar^2\ell(\ell+1)$, ahol $\ell = 0, 1, 2, \ldots$ tetszőleges nem negatív egész szám lehet. Ha a pályaimpulzusmomentum négyzete a $\hbar^2\ell(\ell+1)$ értéket veszi fel, ahol ℓ a fenti értékek valamelyike, akkor a pályaimpulzusmomentum z-irányú vetülete még $2\ell+1$ darab érték valamelyikét veheti fel: $\ell_z = \hbar m$, ahol m az $m = -\ell, -\ell+1, \ldots, 0, \ldots, \ell-1, \ell$ egész számok valamelyike. A megfelelő sajátfüggvények, a gömbfelületi függvények a**

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_z Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) &= m\hbar Y_{\ell,m}(\theta,\varphi), \\ \hat{\boldsymbol{\ell}}^2 Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) &= \hbar^2\ell(\ell+1) Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) \end{aligned} \tag{3.5.69}$$

sajátértékegyenletek megoldásai, ahol a sajátértékeket már explicit módon tüntettük fel. Az adott ℓ-hez tartozó $Y_{\ell,m}$ sajátfüggvények az impulzusmomentum-állapotok $\mathcal{H}$ terének egy $2\ell+1$-dimenziós alterét feszítik ki, mint ortonormált bázisfüggvények,

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta Y^*_{\ell',m'}(\theta,\varphi) Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) = \delta_{\ell,\ell'}\delta_{m,m'}. \tag{3.5.70}$$

A különböző ℓ értékekhez tartozó alterek páronként szintén ortogonálisak egymásra. Egy-egy adott $\hbar^2\ell(\ell+1)$ sajátértékhez tartozó $2\ell+1$-dimenziós altér a térbeli forgatások során invariáns. Ha elforgatjuk a térben a koordinátarendszerünket, akkor egy ilyen altér bázisvektorai egymás lineáris kombinációiba transzformálódnak.

A $\hat{\ell}_\pm$ léptető operátorok az $\hat{\boldsymbol{\ell}}^2, \hat{\ell}_z$ operátorok sajátfüggvényeire az alábbiak szerint hatnak:

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_+|\ell,m\rangle &\begin{cases} \propto |\ell,m+1\rangle, & \text{ha } m = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell-1 \\ = 0, & \text{ha } m = \ell \end{cases}, \\ \hat{\ell}_-|\ell,m\rangle &\begin{cases} \propto |\ell,m-1\rangle, & \text{ha } m = -\ell+1, \ldots, \ell \\ = 0, & \text{ha } m = -\ell \end{cases} \end{aligned} \tag{3.5.71}$$

Ezek az operátorok tehát nem változtatják meg az impulzusmomentum négyzetének sajátértékét, csak az impulzusmomentum z-komponensének sajátértékét léptetik eggyel fel- ill. lefelé.

3.5.8. Forgásszimmetrikus egy-részecskés rendszer stacionárius állapotai

Már megtanultuk, hogy a pályaimpulzusmomentum operátorának egyes Descartes-komponensei a Descartes-koordinátarendszer megfelelő tengelyei körüli infinitezimális elforgatásokat generálják. Azt is megmutattuk, hogy ha a pontrészecske[29] szabad, vagy forgásszimmetrikus

[29] Továbbra is $s = 0$ spinű részecskéről beszélünk.

külső térben van, azaz ha a részecske $\hat{H}$ Hamilton-operátora invariáns a térbeli elforgatásokkal szemben, akkor a Hamilton-operátor felcserélhető az impulzusmomentum valamennyi Descartes-komponensének az operátorával,

$$[\hat{\ell}_j, \hat{H}] = 0. \tag{3.5.72}$$

Ekkor a pontrészecske $\hat{H}$ Hamilton-operátorának, a pályaimpulzusmomentuma z-irányú vetülete $\hat{\ell}_z$ operátorának és a pályaimpulzusmomentum négyzete $\hat{\vec{\ell}}^{\,2}$ operátorának van közös sajátfüggvényrendszere, mert ezek az operátorok páronként felcserélhetők egymással. A pályaimpulzusmomentum sajátértékeiről és sajátfüggvényeiről tanultakat figyelembe véve, azt mondhatjuk tehát, hogy **a forgásszimmetrikus egy-részecskés fizikai rendszernek az energiasajátállapotai egyúttal pályaimpulzusmomentum sajátállapotok.** Minden egyes energiaszintet az E energiája mellett az is jellemez, hogy mi a részecske pályaimpulzusmomentuma négyzetének $\hbar^2\ell(\ell+1)$ sajátértéke. A részecske E energiája nyilván csak $\hat{\ell}^2$ sajátértékétől, azaz ℓ értékétől függhet, nem függhet azonban $\hat{\ell}_z$ sajátértékétől, mert az sértené a forgásszimmetriát. Ezért **minden egyes energiaszint $2\ell+1$-szeresen elfajult, mert bármely, adott E energiával és ℓ kvantumszámmal jellemzett energiaszinthez $2\ell+1$ darab lineárisan független, páronként ortogonális állapot tartozik, amelyek a pályaimpulzusmomentum z-irányú vetületének értéke tekintetében különböznek csak egymástól**[30]**.** Ezt a $(2\ell+1)$ darab , független állapotot **multiplettnek** nevezzük. **A forgási szimmetria azt eredményezi, hogy az egyes energiaszintekhez állapot-multiplettek tartoznak.**

Arról, hogy a Természetben csakugyan vannak ilyen multiplettek, úgy tudunk meggyőződni, hogy a forgásszimmetriát valamilyen módon ,,kicsit" megsértjük, és akkor az eredetileg azonos energiasajátértékhez tartozó állapotok ,,kicsit" különböző energiákhoz fognak tartozni. Némi ügyességgel ezeket a kicsit különböző, energiában nagyon közeli állapotokat tudjuk aztán megfigyelni. **A szimmetria multiplettek révén történő megvalósulását nevezzük a szimmetria Wigner**[31]**-féle megvalósulásának.**

3.6. A teljes impulzusmomentum és a spin

3.6.1. A teljes impulzusmomentum

Megtanultuk, hogy a pályaimpulzusmomentum operátora a hullámfüggvény transzformációját generálja a koordináta-rendszer térbeli elforgatásai során. Feltehetjük azt a kérdést, hogy vajon a pályaimpulzusmomentum operátora a legáltalánosabb olyan $\hat{\vec{\jmath}}$ axiálvektor-operátor, amelyik térbeli elforgatásokat generál. Azt kérdezzük, hogy mi az a legáltalánosabb

[30] Általánosságban (a Hamilton-operátor konkŕet alakjának ismerete nélkül) nem zárható ki az a lehetőség sem, hogy pl. két különböző ℓ értékhez tartozó multiplett energiája azonos legyen. A fontos azonban az, hogy minden energiaszint teljes, ℓ-szerinti multipletteket tartalmaz.

[31] Wigner Jenő (1902-1995, magyar-amerikai) fizikus részesült az 1963. évi fizikai Nobel-díjban felerészben, hozzájárulásáért az atommagok és az elemi részek elméletéhez, amelyben jelentős szerepe volt az alapvető szimmetriaelvek felfedezésének és alkalmazásának. Az 1963. évi fizikai Nobel-díj másik felét egyenlő arányban Maria Goeppert-Mayernek (1906-1972, amerikai) és Johannes Hans D. Jensennek (1907-1973, német) ítélték oda az atommagok héjszerkezetére vonatkozó felfedezéseikért.

$\hat{\vec{j}}$ operátor, amely általában a Descartes-koordináta-rendszernek a i-edik koordinátatengely körüli, infinitezimális $\delta\alpha_i$ $(i = 1, 2, 3)$ szögű elforgatása során leírja az állapotvektor infinitezimális megváltozását,

$$|\Psi\rangle \to |\Psi\rangle - \frac{i}{\hbar}\hat{j}_i \delta\alpha_i |\Psi\rangle. \tag{3.6.1}$$

A matematika csoportelmélet nevű ága erre azt a választ adja, hogy a térbeli elforgatások generátorai olyan $\hat{j}_i$ $(i = 1, 2, 3)$ önadjungált operátorok, amelyek a

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_j] = i\hbar\epsilon_{i,j,k}\hat{j}_k, \quad [\hat{\vec{j}}^2, \hat{j}_i] = 0 \tag{3.6.2}$$

cserelációkat elégítik ki, ahol $\hat{j}_1 = \hat{j}_x$, $\hat{j}_2 = \hat{j}_y$, $\hat{j}_3 = \hat{j}_z$ a $\hat{\vec{j}}$ axiálvektor-operátor Descartes-komponenseinek tekinthetők, és

$$\hat{\vec{j}}^2 = \sum_{i=1}^{3} \hat{j}_i^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2. \tag{3.6.3}$$

Ha egy fizikai rendszer térbeli elforgatási szimmetriával rendelkezik, akkor ez azt jelenti, hogy a rendszer $\hat{H}$ Hamilton-operátora felcserélhető a $\hat{j}_i$ operátorok mindegyikével és így $\hat{\vec{j}}^2$-tel is:

$$[\hat{j}_i, \hat{H}] = 0, \quad [\hat{\vec{j}}^2, \hat{H}] = 0. \tag{3.6.4}$$

Forgásszimmetrikus rednszer esetén tehát az elforgatásokat generáló $\hat{\vec{j}}$ operátor megmaradó mennyiség operátora. Azé a megmaradó mennyiségé, amelyik azért marad meg, mert a rendszer forgásszimmetrikus. Definíció szerint ezt a mennyiséget a rendszer teljes impulzusmomentumának nevezzük. A térbeli elforgatások generátorai tehát a teljes impulzusmomentum komponensei. A teljes impulzusmomentum megmaradása tehát az jelenti, hogy a fizikai rendszer időbeli változása során a $\hat{j}_i$ operátorok várható értékei nem változnak, időben állandók. Ha $|\psi(t)\rangle$ a rendszer időben változó állapotvektora, akkor a forgásszimmetria fennállása esetén

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\hat{j}_i|\psi(t)\rangle = 0 \tag{3.6.5}$$

teljesül a teljes impulzusmomentum minden $i = 1, 2, 3$ komponensének várható értékére.

Mivel az elforgatások generátorai közül semmelyik kettő sem cserélhető fel, azért egyidejűleg csak a teljes impulzusmomentum négyzete, $\hat{\vec{j}}^2$ és tetszőleges z-tengelyre vett $\hat{j}_z$ vetülete mérhető. Kérdés, hogy melyek ennek a két operátornak a közös sajátvektorai és azok milyen sajátértékekhez tartoznak. A csoportelmélet erre a következő választ adja: **A teljes impulzusmomentum négyzetének sajátértékei $\hbar^2 j(j+1)$, ahol $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots$ értékek lehetségesek. Azt szoktuk mondani, hogy a rendszer teljes impulzusmomentuma j, ami lehet tetszőleges nem negatív egész szám és tetszőleges pozitív fél-egész szám. Ha a rendszer j teljes impulzusmomentuma adott, akkor a teljes impulzusmomentum tetszőleges z-tengelyre vett $\hat{j}_z$ vetületének lehetséges sajátértékei $\hbar m_j$, ahol $m_j = -j, -j+1, \ldots, j-1, j$. A $\hat{\vec{j}}^2$ és $\hat{j}_z$ operátorok közös sajátvektorainak adott j-vel (a $\hat{\vec{j}}^2$ adott**

$\hbar^2 j(j+1)$ **sajátértékével) jellemzett altere tehát** $(2j+1)$**-dimenziós. A normált sajátvektorokat** $|j, m_j\rangle$ **alakban jelölve, azok a**

$$\hat{\vec{j}}^2|j, m_j\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, m_j\rangle, \quad \hat{j}_z|j, m_j\rangle = \hbar m_j|j, m_j\rangle \tag{3.6.6}$$

sajátérték-egyenleteket elégítik ki.

Forgásszimmetrikus rendszer stacionárius állapotai a $\hat{H}$ **Hamilton-operátornak, a teljes impulzusmomentum négyzete** $\hat{\vec{j}}^2$ **operátorának és a teljes impulzusmomentum tetszőleges** z**-tengelyre vett vetülete operátorának a közös sajátállapotai,** hiszen ezek az operátorok páronként felcserélhetők. Ez azt jelenti, hogy **a forgásszimmetrikus rendszer energia-spektrumában minden energiaszint az impulzusmomentum négyzetének adott sajátértékével, adott** j**-vel jellemezhető. Továbbá minden adott** j**-vel jellemzett energiaszinthez a stacionárius impulzusmomentum-sajátállapotoknak egy** $(2j+1)$**-dimenziós altere tartozik. Minden energiaszinthez tehát egy multiplett, egy „**$(2j+1)$**-plett" tartozik.**

3.6.2. A spin

Mit tettünk ebben a fejezetben eddig? A matematika, pontosabban a csoportelmélet eredményeire hivatkozva megállapítottuk, hogy a fizikai rendszerek teljes impulzusmomentuma elvileg lehet egész és fél-egész értékű. A pályaimpulzusmomentumról a tanultak alapján tudjuk, hogy az egész értékek biztosan megvalósulnak a Természetben. Ugyanakkor a pályaimpulzusmomentumról tanultak alapján azt is beláthatjuk, hogy (belső szerkezet nélküli részecske esetén) pályamozgásból nem származhatnak a teljes impulzusmomentum fél-egész értékei[32]. Az izgalmas kérdés tehát az, hogy megvalósulnak-e a Természerben az impulzusmomentum feles értékei?

A tapasztalat szerint a fizikai rendszerek akkor is rendelkezhetnek valamely inerciarendszerben impulzusmomentummal, ha abban nyugalomban vannak. Az inerciarendszerben nyugvó fizikai rendszer teljes impulzusmomentumát **sajátimpulzusmomentumnak, spinnek nevezzük,** mert ez nyilvánvalóan nem a rendszernek, mint egésznek a haladó mozgásból származó pályaimpulzusmometuma. **A tapasztalat azt mutatja, hogy vannak részecskék, amelyek nem rendelkeznek (legalábbis jelenlegi ismereteink szerint) belső szerkezettel, és a spinjük mégsem nulla.**

[32]Később, az impulzusmomentumok összeadási szabályával megismerkedve majd azt is kijelenthetjük, hogy belső szerekezettel rendelkező részecske fél-egész értékű teljes impulzusmomentuma szintén nem származhat csak pályaimpulzusmomentumok összeadásából. Ha fel is tesszük, hogy a rendszer N darab részecskéből áll, amelyek mozognak a rendszeren belül és nem nulla pályaimpulzusmomentumot hordoznak, akkor is az l_a $(a = 1, 2, \ldots, N)$ egész értékű impulzusmomentumok összeadása révén csak L egész értékű eredő pályaimpulzusmomentum jöhet létre.

	Család	Részecske	Spin (S)
Fermionok	Leptonok	Elektron	$\frac{1}{2}$
		Müon	$\frac{1}{2}$
		Tau	$\frac{1}{2}$
		Neutrínók	$\frac{1}{2}$
	Kvarkok	Kvarkok	$\frac{1}{2}$

	Részecske	Spin (S)
Bozonok	Foton	1
	Vektorbozonok ($W^{\pm}$, Z^0)	1
	Gluonok	1
	Graviton(?)	2

Ilyenek pl. az elektronok, a kvarkok, stb. **A feles spinű részecskéket fermionoknak, az egész spinűeket bozonoknak nevezzük.**

Általában a részecskékből felépülő fizikai rendszerek spinje részben az egyes részecskék sajátimpulzusmomentumaiból, részben pedig azok pályaimpulzusmomentumaiból tevődik össze. **Általában amikor arra akarunk utalni, hogy az eredő impulzusmomentum pályamozgásból és a rendszert felépítő részecskék sajátimpulzusmomentumaiból tevődik össze, akkor szokásos a ,, teljes impulzusmomentum" szóhasználat.**

3.6.3. Az impulzusmomentumok összeadása

Tudjuk, hogy a részecske térbeli mozgása eredményezheti, hogy a részecske pályaimpulzusmomentuma nem zérus. Láttuk, hogy a pályaimpulzusmomentum sajátállapotok $\ell \geq 0$ egész értékekkel jellemezhetők. A pályaimpulzismomentum sajátállapotok megvalósítják a teljes impulzusmomentum egész értékkel jellemzett sajátállapotait. A tapasztalat azonban azt mutatja, hogy a pl. nyugalomban levő elektron két-állapotú rendszer, ami a teljes implzusmomentum $\frac{1}{2}$ értékéhez tartozó állapotokat valósítja meg, azaz hogy az elektronnak nem pályamozgásból származó, $\hat{\vec{s}}$ sajátimpulzusmomentuma, azaz spinje van. Evvel alább egy külön fejezetben foglalkozunk.

Általában azt mondhatjuk, hogy a $\hat{\vec{\jmath}}$ teljes impulzusmomentum egyetlen részecske esetén is különböző fizikai eredetű lehet:

1. a teljes impulzusmomentum származhat a részecske pályamozgásából, s ilymódon lehet azonos a részecske pályaimpulzusmomentumával (ha a részecske sajátimpulzusmomentuma zérus),

2. a teljes impulzusmomentum származhat a részecske saját impulzusmomentumától, más néven spinjétől (ha a részecske nem végez pályamozgást, azaz $\ell = 0$ sajátállapotban van),

3. a teljes impulzusmomentumhoz egyidejűleg hozzájárulhat a részecske pályaimpulzusmomentuma és spinje.

Felvetődik ezért az a kérdés, hogy hogyan kell a részecske pályaimpulzusmomentuma és és spinje segítségével a részecske teljes impulzusmomentumát meghatározni? Később, egynél több részecskét tartalmazó rendszerekben hasonló kérdés úgy is felmerül, hogy hogyan kell két részecske teljes impulzusmomentumából a két-részecskés alrendszer teljes (eredő) impulzusmomentumát meghatározni. A szabály, – **az impulzusmomentumok összeadásának szabálya** – minden esetben ugyanaz, teljesen általános, és a csoportelmélet segítségével lehet levezetni. Alább az impulzusmomentum-összeadás általános

szabályát két tetszőleges, $\hat{\vec{j}}_1$ és $\hat{\vec{j}}_2$ impulzusmomentum esetén fogalmazzuk mge.. Itt bármelyik $\hat{\vec{j}}_a$ $(a = 1, 2)$ jelenthet teljes impulzusmomentumot, pályaimpulzus momentumot és spint egyaránt.

A csoportelmélet először is arra tanít meg, hogy **impulzusmomentumok eredőjének operátorát, azaz a vizsgált fizikai rendszer teljes impulzusmomentumának $\hat{\vec{J}}$ operátorát, a rendszer diszjunkt részei impulzusmomentum-operátorainak összegeként kell értelmezni.** Tekintsünk egy rendszert amelynek ,,két része" van, amelyek egyike j_1, másika j_2 impulzusmomentumú állapotban van. A rendszer $\psi(1, 2)$ hullámfüggvénye tehát az egyik, ill. a másik rész rendre 1-gyel, ill. 2-vel jelölt ,,koordinátáinak" függvénye. Az egyik rész teljes impulzusmomentumának operátora legyen $\hat{\vec{j}}_1$, a másiké $\hat{\vec{j}}_2$. Ezek az operátorok rendre a hullámfüggvény 1, ill. 2 változóira hatnak. **Ekkor a rendszer teljes impulzusmomentumának operátora**

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{j}}_1 + \hat{\vec{j}}_2 \tag{3.6.7}$$

az egyes részei teljes impulzusmomentumai operátorainak az összege [33]**.**

Ami az operátorok nyelvén egyszerű összeadás, az sokkal bonyolultabb szabályt jelent arra vonatkozóan, hogy milyenek lehetnek a teljes impulzusmomentum négyzetének, $\hat{\vec{J}}^2$-nek és z-irányú vetületének, $\hat{J}_z$-nek rendre a $\hbar^2 J(J+1)$ és $\hbar M_J$ sajátértékei, ha tudjuk, hogy az egyi k ill. a másik rész teljes impulzusmomentuma j_1, ill. j_2. A lehetséges (J, M_J) sajátértékek meghatározásának szabályát nevezzük **az impulzusmomentumok összeadási szabályának.**

A két ,,részből" álló rendszer $\psi(1, 2)$ hullámfüggvény egyidejűleg sajátfüggvénye a $\hat{\vec{j}}_1^2$ és a $\hat{\vec{j}}_2^2$ operátoroknak,

$$\hat{\vec{j}}_1^2 \psi(1, 2) = \hbar^2 j_1(j_1 + 1)\psi(1, 2), \quad \hat{\vec{j}}_2^2 \psi(1, 2) = \hbar^2 j_2(j_2 + 1)\psi(1, 2). \tag{3.6.8}$$

ez jelenti, hogy az egyik rész teljes impulzusmomentuma j_1, a másiké pedig j_2. A $\psi(1, 2)$ állapotok között véges sok lineárisan független állapot található. A lineárisan független $\psi(1, 2)$ állapotokat választhatjuk úgy, hogy azok egyúttal a $\hat{j}_{1,z}$ és $\hat{j}_{2,z}$ operátorknak is sajátfüggvényei legyenek, hiszen a $\hat{\vec{j}}_1^2$, $\hat{\vec{j}}_2^2$, $\hat{j}_{1,z}$, $\hat{j}_{2,z}$ operátorok a páronként felcserélhető impulzusmomentum-operátorok maximális halmazát képezik, amelyhez már nem vehető hozzá további olyan impulzusmomentum-operátor, amelyik a halmaz minden operátorával felcserélhető lenne. Ezért az impulzusmomentum sajátállapotok kimerítő jellemzése történhet ezen operátorok kvantumszámaival, azaz a (j_1, m_1, j_2, m_2) adatokkal. A megfelelő $\psi(1, 2)$ állapotok $\chi_{j_1,m_1}(1)\chi_{j_2,m_2}(2)$ alakúak, ahol $\chi_{j_a,m_a}(a)$ az a-adik rész $\hat{\vec{j}}_a^2$ és $\hat{j}_{a,z}$ operátorának közös sajátfüggvénye, úgyhogy

$$\begin{aligned}
&\hat{\vec{j}}_1^2 \chi_{j_1,m_1}(1)\chi_{j_2,m_2}(2) = \hbar^2 j_1(j_1 + 1)\chi_{j_1,m_1}(1)\chi_{j_2,m_2}(2),\\
&\hat{\vec{j}}_2^2 \chi_{j_1,m_1}(1)\chi_{j_2,m_2}(2) = \hbar^2 j_2(j_2 + 1)\chi_{j_1,m_1}(1)\chi_{j_2,m_2}(2),\\
&\hat{j}_{1,z}\chi_{j_1,m_1}(1)\chi_{j_2,m_2}(2) = \hbar m_1 \chi_{j_1,m_1}(1)\chi_{j_2,m_2}(2),\\
&\hat{j}_{2,z}\chi_{j_1,m_1}(1)\chi_{j_2,m_2}(2) = \hbar m_2 \chi_{j_1,m_1}(1)\chi_{j_2,m_2}(2).
\end{aligned} \tag{3.6.9}$$

[33] Ennek indoklását a részecskerendszerek teljes impulzusmomentumáról szóló fejezetben adjuk meg.

A részek koordinátáit szeparáltan tartalmazó, szorzatalakú $\chi_{j_1,m_1}(1)\chi_{j_2,m_2}(2)$ állapotok kifeszítik a $\psi(1,2)$ állapotok teljes Hilbert-terét. Egy ortonormált bázist alkotnak a két „részből" álló fizikai rendszer impulzusmomentum-állapotainak Hilbert-terében. Ezek az állapotok azonban nem sajátállapotai a teljes impulzusmomentum négyzete $\hat{\vec{J}}^2$ operátorának. Ugyanakkor a $\psi(1,2)$ impulzusmomentum-állapotok Hilbert-terében találhatunk olyan bázisállapotokat, amelyek a teljesimpulzumomentum négyzetének, $\hat{\vec{J}}^2$-nek és z-irányú vetületének, $\hat{J}_z$-nek közös sajátállapotai és egyúttala részek teljes impulzusmomentuma négyzetének, azaz a $\hat{\vec{j}}_a^2$ $(a = 1,2)$ operátoroknak is sajátállapotai. Valóban, a $\hat{\vec{J}}^2$, $\hat{J}_z$, $\hat{\vec{j}}_1^2$, $\hat{\vec{j}}_2^2$ operátorok is páronként felcserélhetőek és szintén a $\psi(1,2)$ impulzusmomentum-állapotok Hilbert-tere fölött ható, páronként felcserélhető operátorok maximális halmazát alkotják. Az impulzusmomentum-állapotok Hilbert-terében létezik tehát egy ortonormált bázis, amelyet a fenti operátorok sajátértékeivel, azaz a (J, M_J, j_1, j_2) kvantumszámokkal kimerítően jellemezhetünk, jelöljük ezek hullámfüggvényét $\psi_{J,M,j_1,j_2}(1,2)$-vel. Ezekre tehát az alábbi sajátérték-egyenletek állnak fenn:

$$\begin{aligned}
\hat{\vec{j}}_1^2\psi_{J,M,j_1,j_2}(1,2) &= \hbar^2 j_1(j_1+1)\psi_{J,M,j_1,j_2}(1,2)\\
\hat{\vec{j}}_2^2\psi_{J,M,j_1,j_2}(1,2) &= \hbar^2 j_2(j_2+1)\psi_{J,M,j_1,j_2}(1,2)\\
\hat{\vec{J}}^2\psi_{J,M,j_1,j_2}(1,2) &= \hbar^2 J(J+1)\psi_{J,M,j_1,j_2}(1,2),\\
\hat{J}_z\psi_{J,M,j_1,j_2}(1,2) &= \hbar M_J\psi_{J,M,j_1,j_2}(1,2).
\end{aligned} \tag{3.6.10}$$

Könnyű belátni, hogy $[\hat{\vec{J}}^2, \hat{j}_{a,z}] \neq 0$ miatt az egyes részek teljes impulzusmomentumának vetületei az eredő teljes impulzusmomentum jól definált értéke esetén nem jól definiáltak.

A csoportelmélet eszközeivel belátható, hogy **az eredő teljes impulzusmomentum négyzetének $\hbar^2 J(J+1)$ és z-vetületének $\hbar M_J$ lehetséges értékeit az impulzusmomentumok alábbi összeadási szabálya határozza meg:**

$$J = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \ldots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2, \tag{3.6.11}$$

ill. adott J esetén M_J lehetséges értékei $M_J = -J, -J+1, \ldots, J-1, J$. Tehát M_J $(2J+1)$-féle különböző értéket vehet fel és mindegyiket csak egyszer. Nem nehéz belátni, hogy a $\chi_{j_1,m_1}(1)\chi_{j_2,m_2}(2)$ bázis számossága és a $\psi_{J,M,j_1,j_2}(1,2)$ bázis számossága pontosan megegyezik, hiszen

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2J+1) = (2j_1+1)(2j_2+1). \tag{3.6.12}$$

A $\psi(1,2)$ impulzusmomentum-állapotok terét a $\chi_{j_1,m_1}\chi_{j_2,m_2}$ bázisvektorok is kifeszítik, és a tetszőleges ψ_{J,M,j_1,j_2} sajátállapotok is. Természetesen az utóbbiak felírhatók, mint az előbbiek lineárkombinációi:

$$|JM; J_1J_2\rangle = \sum_{M_1,M_2} (JM|J_1M_1J_2M_2)|J_1, M_1\rangle \otimes |J_2, M_2\rangle, \tag{3.6.13}$$

ahol $(JM|J_1M_1J_2M_2)$ **az úgynevezett Clebsch**[34]**-Gordan**[35]**-együtthatók.** Értéküket a csoportelmélet módszereivel meghatározták, ill. algoritmust adtak meg a kiszámolásukra.

3.6.4. Az elektron spinje. Az $\frac{1}{2}$-spin

Mielőtt tovább halad, olvassa el a függelék A.1.4 részét! Ott azt ismertetjük, hogy hogyan lehetett kísérleti tényekből arra következtetni, hogy az elektronnak nem zérus a spinje. A kísérletek eredményeiből az derült ki, hogy az elektron spinje tetszőleges irányú tengelyre vett vetületének két lehetséges értéke van. Ennek alapján azt kell mondanunk, hogy az elektron spinállapotainak a tere 2-dimenziós. Az s spinű részecske spinállapotainak tere másrészről $(2s+1)$-dimenziós. Így **az elektron spinállapotainak tere**

$$2s+1=2 \tag{3.6.1}$$

dimenziós, azaz az elektron spinje $s=\frac{1}{2}$**. Az elektron tehát fermion.**

Jelölje $\hat{\vec{s}}$ az elektron spinjének az operátorát! A spin Descartes-komponenseinek operátoraira fennállnak az impulzusmomentum operátorára általános érvényű csererelációk:

$$[\hat{s}_j,\hat{s}_k]=i\hbar\epsilon_{j,k,l}\hat{s}_l, \qquad [\hat{s}_j,\hat{\vec{s}}^{\,2}]=0. \tag{3.6.2}$$

Az elektron spinállapotainak terét azok az $|\frac{1}{2}\ m_s\rangle$ ortonormált bázisállapotok feszítik ki, amelyek a spin négyzetének és z-irányú vetületének közös sajátállapotai:

$$\hat{\vec{s}}^{\,2}|\frac{1}{2}\ m_s\rangle=\frac{3\hbar^2}{4}|\frac{1}{2}\ m_s\rangle, \qquad \hat{s}_z|\frac{1}{2}\ m_s\rangle=\hbar m_s|\frac{1}{2}\ m_s\rangle, \tag{3.6.3}$$

ahol $m_s=\pm\frac{1}{2}$ lehet.

Szimbolikusan jelölhetjük a bázisvektorokat az

$$|\frac{1}{2},\ m_s=+\frac{1}{2}\rangle \Leftrightarrow \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \quad |\frac{1}{2},\ m_s=-\frac{1}{2}\rangle \Leftrightarrow \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{3.6.4}$$

számoszlopokkal. Ekkor az állapottér az összes

$$c_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+c_2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix} \tag{3.6.5}$$

alakú számoszlopokkal ábrázolt állapotvektorok tere, ahol c_1 és c_2 tetszőleges komplex számok. Ha az állapottér vektorainak kételemű számoszlopokat feleltetünk meg, akkor a spin operátorainak 2×2-es mátrixokat kell megfeleltetni. A spin Descartes-komponenseinek csererelációit kielégítő 2-es mátrixok megválaszthatók

$$\hat{s}_j=\frac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}_j \tag{3.6.6}$$

[34]Rudolf Friedrich Alfred Clebsch (1833-1872, német) matematikus, az invariánselmélet, a projektív geometria és az elgebrai geometria terén fejtett ki jelentős tevékenységet

[35]Paul Gordan (1837-1912, német) matematikus, különösen az algebrai geomatriában végzett munkássága fontos, továbbfejlesztett az invariánsok elméletét.

alakban, ahol ahol $\hat{\sigma}_j$ $(j = 1, 2, 3)$ az úgynevezett **Pauli**[36]**-mátrixok:**

$$\hat{\sigma}_1 \equiv \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2 \equiv \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_3 \equiv \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{3.6.7}$$

A Pauli-mátrixok önadjungált mátrixok. Bármelyikük négyzete egységmátrix,

$$\hat{\sigma}_j^2 = \hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{3.6.8}$$

Könnyű közvetlen számolással ellenőrizni, hogy

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} &= \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} &= -\frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{3.6.9}$$

Tanulságos utánajárni, hogy melyik pl. az az állapot, amelyikben a spinnek mondjuk az x-komponense $+\frac{1}{2}\hbar$ értékű. Erre a

$$\frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{3.6.10}$$

sajátérték-egyenletnek kell teljesülnie, ahonnan $c_1 = c_2$ adódik. Mivel az állapotvektorok normálása miatt $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$, azért a szóbanforgó állapot

$$\frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{3.6.11}$$

alakú kell legyen, ahol $\alpha \in [0, 2\pi)$ valós szám lehet. Ez az állapot a spin z-vetülete sajátállapotainak lineáris kombinációja. Ez így is kell legyen, mert a spin z-vetülete sajátvektorai teljes rendszert alkotnak a spinállapotok 2-dimenziós terében. Természetesen a spin bármilyen, nem z-irányú vetületének sajátvektorai is a spin z-vetülete sajátállapotainak lineáris kombinációi.

A továbbiakban jelöljük a spin z-irányú vetületének sajátvektorait egyszerűen csak $|\pm\rangle$ alakban, elhagyva a nyilvánvaló $s = \frac{1}{2}$-et és az $m_s = \pm\frac{1}{2}$ sajátértékeknek csak az előjelét tüntetve fel.

Ha a spin-ábrázolásban keressük a $|\chi\rangle$ spin-állapotú elektron spin-hullámfüggvényét, akkor az $\chi_\sigma \equiv \langle\sigma|\chi\rangle$ alakú, ahol a σ „spinváltozó" csak a diszkrét $\sigma = \pm\frac{1}{2}$ értékeket veheti fel. A $|\pm\rangle$ bázisban maguknak a $|\pm\rangle$ állapotoknak a $\chi_\sigma^{[\pm]} = \delta_{\sigma,\pm\frac{1}{2}}$, 2 diszkrét pontban értelmezett, a diszkrét 0 és 1 értékeket felvevő spin-hullámfüggvények felelnek meg. Ha a spin-hullámfüggvények $\sigma = \pm\frac{1}{2}$ pontokban felvett értékeit számoszlopokba foglaljuk,

$$\chi_\sigma^{[+]} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_\sigma^{[-]} \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{3.6.12}$$

akkor visszakapjuk a korábban már bevezetett számoszlop-alakot, ahol a felső, ill. az alsó „sor" felel meg rendre a független változó $\sigma = +\frac{1}{2}$, ill. $\sigma = -\frac{1}{2}$ értékeinek.

[36] Wolfgang Paulinak (1900-1958, osztrák) ítélték oda az 1945. évi fizikai Nobel-díjat a kizárási elv felfedezéséért, amelyet Pauli-elvnek is hívnak.

4. EGYSZERŰ FIZIKAI RENDSZEREK

4.1. Spin külső mágneses térben

Először egy egy-szabadsági fokú rendszerrel foglalkozunk. Tekintsünk egy elektront, amelynek eltekintünk a térbeli mozgásától, egyedül a spinjének a mozgását vizsgáljuk. Az elektron spinjéhez az elektron negatív töltésének következtében ellentétes irányú mágneses momentum tartozik, $\vec{\mu} = -g_s\vec{s}$ ($g_s > 0$), ezért az elektron spinjére külső mágneses térrel tudunk hatni. Az arányossági tényező az elektron giromágneses együtthatója,

$$g_s = \frac{|e|}{m_e c}, \tag{4.1.1}$$

ahol $-|e|$ és m_e rendre az elektron töltése és nyugalmi tömege, c pedig a fény sebessége vákuumban[37]. A modell, amit vizsgálunk, egy térbeli pontban rögzített $s = \frac{1}{2}$ spin, ill. a hozzá tartozó mágneses dipólmomentum.

4.1.1. Szabad spin

Tegyük fel, hogy semmilyen mágneses tér nem hat az elektron spinjére. Az ilyen rendszer a térben teljesen forgásszimmetrikus, az elektront a megmradó $s = \frac{1}{2}$ spin jellemzi. A nyugvó elektron $\hat{H}$ Hamilton-operátorának felcserélhetőnek kell lennie a spin bármely $\hat{s}_j$ ($j = 1, 2, 3$) Descartes-komponensével:

$$[\hat{s}_j, \hat{H}] = 0, \quad (j = 1, 2, 3). \tag{4.1.2}$$

Az ilyen Hamilton-operátor az $\hat{\vec{s}}^{\,2}$ operátor függvénye kell legyen, hiszen a spin négyzetének operátora felcserélhető a spin bármelyik Descartes-komponensének $\hat{s}_j$ ($j = 1, 2, 3$) operátorával. Ezért úgy vehetjük, hogy az elektron spinjének a Hamilton-operátora,

$$\hat{H} = H(\hat{\vec{s}}^{\,2}), \tag{4.1.3}$$

ahol a spin négyzete önadjungált operátor (akárcsak az egyes Descartes-kompponensek operátorai). A spin négyzet
'enek operátora az egység-operátor számszorosa,

$$\hat{\vec{s}}^{\,2} = \frac{1}{4}\hbar^2\hat{\vec{\sigma}}^{\,2} = \frac{1}{4}\hbar^2\sum_{j=1}^{3}\hat{\sigma}_j^2 = \frac{1}{4}\hbar^2\sum_{j=1}^{3}\hat{1} = \frac{3}{4}\hbar^2\hat{1}, \tag{4.1.4}$$

[37] A giromágneses együttható kifejezésének nevezőjében a c fénysebesség Gauss-egységrendszer használata esetén szerepel, az SI egységrendszerben $g_s = |e|/m_e$. Bár következetlennek tűnhet, hogy mindenhol a jegyzetben SI egységrendszert használunk és itt meg más egységrendszerben adom meg a giromágneses együttható képletét, mégis ezt választottam, hogy emlékeztessek a giromágneses együttható, ill. a mágnesség relativisztikus eredetére. SI-ben végzett tényleges számolás során természetesen a képletben c helyére dimenziótlan 1 tényezőt kell írni.

és ezért a Hamilton-operátor is az egység-operátor számszorosa:

$$\hat{H} = a\hat{\vec{s}}^{\,2} = \frac{3}{4}\hbar^2 a\hat{1}, \tag{4.1.5}$$

ahol a valós szám, hogy a Hamilton-operátor önadjungált legyen.

A szabad, de térben rögzített $s = \frac{1}{2}$ spin $|\chi(t)\rangle$ spinállapotának Schrödinger-egyenlete:

$$i\hbar\partial_t|\chi(t)\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 a|\chi(t)\rangle. \tag{4.1.6}$$

Adott, $t = 0$ időpillanatbeli $|\chi_0\rangle$ kezdeti állapothoz a

$$|\chi(t)\rangle = e^{-i\frac{3}{4}\hbar a t}|\chi_0\rangle \tag{4.1.7}$$

megoldás tartozik. Ez, mint az az állapot időfüggésének alakjából látszik, stacionárius állapot. Mivel a kezdeti állapot egyidejűleg sajátvektora a spin négyzete operátorának és a Hamilton-operátornak,

$$\hat{\vec{s}}^{\,2}|\chi_0\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\chi_0\rangle, \quad \hat{H}|\chi_0\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 a|\chi_0\rangle, \tag{4.1.8}$$

azért az időtől függő spinállapot is kielégíti ezeket a sajtérték-egyenleteket:

$$\hat{\vec{s}}^{\,2}|\chi(t)\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\chi(t)\rangle, \quad \hat{H}|\chi(t)\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 a|\chi(t)\rangle, \tag{4.1.9}$$

ami azt jelenti, hogy a szabad elektron spinje és energiája az elektron nyugalmi rendszerében megmarad.

A szabad spin tetszőleges irányba mutathat. Az $s = \frac{1}{2}$ spinű elektron spinállapotainak tere 2-dimenziós. Pontosan 2 lineárisan független $|pm\rangle$ állapot létezik, amelyek egyszerre sajátállapotai a spin négyzetének és a spin, egy tetszőleges z-tengelyre vett $\hat{s}_z$ vetületének:

$$\begin{aligned} \hat{\vec{s}}^{\,2}|m_s\rangle &= \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\hbar^2|m_s\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|m_s\rangle, \\ \hat{s}_z|m_s\rangle &= m_s|m_s\rangle, \end{aligned} \tag{4.1.10}$$

ahol $m_s = \pm\frac{1}{2}\hbar$. A spinnek tetszőleges z-tengely irányában a vetülete tehát csak $\pm\frac{1}{2}\hbar$ értékeket vehet fel. Ha tehát a spin tetszőleges tengely irányában vett vetületét mérjük, akkor annak eredményeként a spin ezen sajátállapotok valamelyikébe fog kerülni, azaz ,,felfelé" vagy ,,lefelé" fog mutatni a z-tengely mentén. A spin kétféle beállása azonos energiájú állapot. A szabad $\frac{1}{2}\hbar$ spin energiaszintje kétszeresen degenerált: a spin 2-dimenziós állapotterének minden állapota azonos energiájú.

A kezdeti spinállapotban a spin tetszőleges irányba mutathat, azaz

$$|\chi_0\rangle = c_{+0}|+\rangle + c_{-0}|-\rangle \tag{4.1.11}$$

az általános alakú kezdeti állapot, ahol $c_{\pm 0}$ tetszőleges komplex számok, amelyek eleget tesznek a $\langle\chi_0|\chi_0\rangle = 1$ normálási feltételből következő $|c_{+0}|^2 + |c_{-0}|^2 = 1$ egyenlőségnek. Az időbeli fejlődés során nem változik meg a 2 bázisállapot amplitudójának relatív fázisa, ill. abszolút értéke,

$$|\chi(t)\rangle = c_+(t)|+\rangle + c_-(t)|-\rangle, \quad c_\pm(t) = c_{\pm 0} e^{-i\frac{3}{4}\hbar a t}. \tag{4.1.12}$$

Tetszőleges $|\chi(t)\rangle$ spinállapotnak megfeleltethetjük a $c_\sigma(t) = \langle\sigma|\chi(t)\rangle$ hullámfüggvényt, ahol $\sigma = \pm$ a „spinváltozó”, és amelyet 2-komponensű számoszlop alakjába írhatunk:

$$\begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix} = e^{-i\frac{3}{4}\hbar a t} \begin{pmatrix} c_{+0} \\ c_{-0} \end{pmatrix}. \tag{4.1.13}$$

Ekkor a bázisállapotoknak rendre az alábbi számoszlopok felelnek meg:

$$|+\rangle \;\Rightarrow\; \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |-\rangle \;\Rightarrow\; \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{4.1.14}$$

és a tetszőleges kezdeti állapot

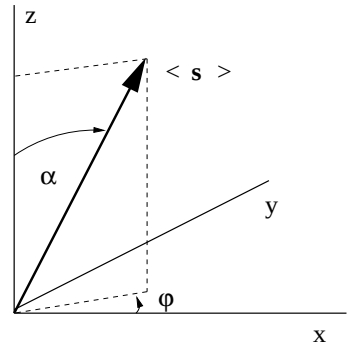
$$|\chi_0\rangle \;\Rightarrow\; \begin{pmatrix} c_{+0} \\ c_{-0} \end{pmatrix} = c_{+0} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_{-0} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{4.1.15}$$

Tanulságos, ha meghatározzuk a spin egyes Descartes-komponenseinek a várható értékét a tetszőleges $|\chi_0\rangle$ állapotban:

$$\begin{aligned}
\langle\chi_0|\hat{s}_z|\chi_0\rangle &= \left[c_{+0}^* \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} + c_{-0}^* \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}\right] \frac{1}{2}\hbar \left[c_{+0} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - c_{-0} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\right] \\
&= \frac{1}{2}\hbar(|c_{+0}|^2 - |c_{-0}|^2), \\
\langle\chi_0|\hat{s}_x|\chi_0\rangle &= \left[c_{+0}^* \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} + c_{-0}^* \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}\right] \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \left[c_{+0} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_{-0} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\right] \\
&= \frac{1}{2}\hbar \left[c_{+0}^* \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} + c_{-0}^* \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}\right] \left[c_{+0} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + c_{-0} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\right] \\
&= \frac{1}{2}\hbar(c_{+0}^* c_{-0} + c_{-0}^* c_{+0}), \\
\langle\chi_0|\hat{s}_y|\chi_0\rangle &= \left[c_{+0}^* \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} + c_{-0}^* \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}\right] \frac{1}{2}\hbar i \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \left[c_{+0} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_{-0} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\right] \\
&= \frac{1}{2}\hbar i \left[c_{+0}^* \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} + c_{-0}^* \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}\right] \left[c_{+0} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - c_{-0} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\right] \\
&= \frac{1}{2}\hbar i(-c_{+0}^* c_{-0} + c_{-0}^* c_{+0}).
\end{aligned} \tag{4.1.16}$$

Ha a normálási feltétel által megengedett legáltalánosabb

$$c_{+0} = \cos\frac{\alpha}{2}, \quad c_{-0} = e^{i\varphi} \sin\frac{\alpha}{2} \tag{4.1.17}$$



2. ábra. Az $s = \frac{1}{2}$ spin vektora $\langle \hat{\vec{s}} \rangle$ várható értékének szemléltetése.

parametrizációval élünk, ahol $\alpha \in [0, \pi]$, $\varphi \in [0, 2\pi]$, akkor azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}
\langle \chi_0 | \hat{s}_z | \chi_0 \rangle &= \frac{1}{2}\hbar\left(\cos^2\frac{\alpha}{2} - \sin^2\frac{\alpha}{2}\right) = \frac{1}{2}\hbar\cos\alpha, \\
\langle \chi_0 | \hat{s}_x | \chi_0 \rangle &= \frac{1}{2}\hbar\cos\frac{\alpha}{2}\sin\frac{\alpha}{2}(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) = \frac{1}{2}\hbar\sin\alpha\cos\varphi, \\
\langle \chi_0 | \hat{s}_y | \chi_0 \rangle &= \frac{1}{2}\hbar i\cos\frac{\alpha}{2}\sin\frac{\alpha}{2}(-e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) = \frac{1}{2}\hbar\sin\alpha\sin\varphi,
\end{aligned} \tag{4.1.18}$$

azaz a spin-komponensek váható értékeiből, mint megfelelő komponensekből képezett „vektor” α szöget zár be a z-tengellyel és az (x, y)-síkra merőleges vetülete pedig φ szöget zár be az x-tengellyel. A számolás során felhasználtuk, hogy

$$\begin{aligned}
\hat{s}_x|+\rangle &= \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar|-\rangle, \\
\hat{s}_x|-\rangle &= \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar|+\rangle, \\
\hat{s}_y|+\rangle &= \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar i\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar i|-\rangle, \\
\hat{s}_y|-\rangle &= \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\hbar i\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\hbar i|+\rangle.
\end{aligned} \tag{4.1.19}$$

Szemléletesen az α és φ szögekkel adott állapotnak az egységsugarú gömb azon pontját feleltethetjük meg, amelyet ezek a szögek, mint gömbi polárkoordináták kijelölnek. Így az $s = \frac{1}{2}$ spin állapotainak 2-dimenziós Hilbert-terét kölcsönösen egyértelműen leképezhetjük az egységsugarú gömb felületére. A $|+\rangle$, ill. a $|-\rangle$ bázisállapotoknak rendre a gömb „északi”, ill. „déli” pólusa felel meg.

Érdekességként jegyezzük meg, hogy jelenleg kifejlődőben van az informatika új ága, **a kvantuminformatika.** A kvantuminformatikában az elemi információt **kvantumbitek, röviden kubitek** tárolják. A kubit egy lehetséges fizikai megvalósítása az elektron spinje. A klasszikus bitnek 2 lehetséges értéke van, a 0 és az 1, ezért a klasszikus bitet olyan klasszikus fizikai rendszerrel lehet megvalósítani, amelynek 2 állapota van (az állapottérben az állapotok száma 2). Ezzel ellentétben

a kubitnek 2 bázisállapota van, amelyeket rendre megfeleltethetünk a kubit 0 és 1 értékének, de ugyanakkor a kubit 2-dimenziós állapottere végtelen sok állapotot tartalmaz, amelyek a 2 bázisállapotnak tetszőleges, 1-re normált lineáris kombinációi. A kubit állapotterének ez a ,,gazdagsága" informatikai szempontból lehetővé teszi, hogy ,,egyszerre" legyen beírva a kubitbe a 0 és az 1 érték. A kvantuminformatikában ezért megnyílik a lehetőség, hogy egyidejűleg különböző kezdeti adatokon végezzük el ugyanazt a számolási műveletsort. Ha egyszer sikerül majd **kvantumszámítógépeket** építeni, akkor azok ezt, a kvantummechanikai lineáris szuperpozíci 'o elvének következményeként megjelenő **,,kvantumpárhuzamosságot"** előnyösen ki tudják majd használni.

4.1.2. Spin homogén külső mágneses térben

Helyezzük az elektron-spint sztatikus, homogén külső mágneses térbe. Kérdezzük meg, hogy melyek a spin stacionárius állapotai. Az elektron spinjéhez a tapasztalat szerint elválaszthatatlanul hozzá tartozik a $\hat{\vec{\mu}} = -g_s\hat{\vec{s}}$ mágneses dipólmomentum, ahol $g_s = \frac{|e|}{m_e c}$ az elektron úgynevezett giromágneses együtthatója, $-|e|$ és m_e rendre az elektron töltése és nyugalmi tömege, c a fénysebesség vákuumban (ld. A.1.4 függeléket). Mágneses dipólmomentumánál fogva, az elektron kölcsönhat a külső, $\vec{B}$ mágneses indukciójú térrel. A klasszikus elektrodinamika szerint a kölcsönhatás potenciális energiája $-\vec{\mu}\cdot\vec{B}$. A megfeleltetési elv alapján a kvantummechanikában a külső mágneses térbe helyezett elektron Hamilton-operátora

$$\hat{H} = a\hat{\vec{s}}^{\,2} - (-g_s)\hat{\vec{s}}\cdot\vec{B} \tag{4.1.20}$$

alakú. Válasszuk a z-tengelyt a mágneses indukció irányának, $B_z = |\vec{B}| > 0$, ekkor

$$\hat{H} = a\hat{\vec{s}}^{\,2} + g_s\hat{s}_z B_z \tag{4.1.21}$$

adódik.

A stacionárius állapotokra vonatkozó Schrödinger-egyenlet:

$$\begin{aligned}\left[a\hat{\vec{s}}^{\,2} + g_s\hat{s}_z B_z\right]|\chi\rangle &= E|\chi\rangle,\\ \left[\frac{3a}{4}\hbar^2\hat{1} + \frac{1}{2}g_s B_z\hbar\hat{\sigma}_z\right]|\chi\rangle &= E|\chi\rangle.\end{aligned} \tag{4.1.22}$$

Oldjuk ezt meg úgy, hogy az $\hat{\vec{s}}^{\,2}$ és $\hat{\vec{s}}_z$ operátorok közös $|\pm\rangle$ sajátvektorai által alkotott bázisban meghatározzuk a $\hat{H}$ Hamilton-operátor mátrixát,

$$(H) = \begin{pmatrix}\langle+|\hat{H}|+\rangle & \langle+|\hat{H}|-\rangle\\ \langle-|\hat{H}|+\rangle & \langle-|\hat{H}|-\rangle\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\frac{3a}{4}\hbar^2 + \frac{1}{2}g_s B_z\hbar & 0\\ 0 & \frac{3a}{4}\hbar^2 - \frac{1}{2}g_s B_z\hbar\end{pmatrix}, \tag{4.1.23}$$

majd azt diagonalizáljuk[38]. Az utóbbi lépés triviális, hiszen a Hamilton-operátor felcserélhető most az $\hat{\vec{s}}^2$ és az $\hat{\vec{s}}_z$ operátorokkal, s ezért a Hamilton-operátor eleve diagonálisnak adódik ezen operátorok közös sajátfüggvény-rendszerében, mint bázisban. Ezért a homogén lineáris egyenletrendszer mátrixa determinánsának eltűnése a

$$\begin{aligned} 0 &= \det \begin{pmatrix} \frac{3a}{4}\hbar^2 + \frac{1}{2}g_s B_z \hbar - E & 0 \\ 0 & \frac{3a}{4}\hbar^2 - \frac{1}{2}g_s B_z \hbar - E \end{pmatrix} \\ &= \left(\frac{3a}{4}\hbar^2 + \frac{1}{2}g_s B_z \hbar - E\right)\left(\frac{3a}{4}\hbar^2 - \frac{1}{2}g_s B_z \hbar - E\right) \end{aligned} \tag{4.1.28}$$

másodfokú[39] egyenletre vezet. Az energia-sajátértékek:

$$E_\pm = \frac{3a}{4}\hbar^2 \pm \frac{1}{2}g_s B_z \hbar. \tag{4.1.29}$$

A szabad spin eredetileg 2-szeresen degenerált energiaszintje **felhasadt** a külső mágneses tér hatására 2, különböző energiaszintre, amelyek energiakülönbsége:

$$\Delta E = g_s B_z \hbar. \tag{4.1.30}$$

[38] A stacionárius Schrödinger-egyenlet,

$$(\hat{H} - E)|\varphi\rangle = 0, \tag{4.1.24}$$

a tetszőlegesen választott $\{|i\rangle\}$ ortonormált bázisban

$$\langle i|(\hat{H} - E)|j\rangle\langle j|\varphi\rangle = 0 \tag{4.1.25}$$

mátrix-egyenlet alakját ölti a $c_j = \langle j|\varphi\rangle$ hullámfüggvényre vonatkozóan. Ez homogén lineáris egyenletrendszer (pontosan annyi darab egyenletet tartalmaz, ahány dimenziós a Hilbert-tér). A homogén lineáris egyenletrendszernek akkor és csak akkor létezik nem triviális megoldása, ha az egyenletrendszer determinánsa zérus. Ezért a stacionárius állapotokhoz tartozó energiasajátértékeket a

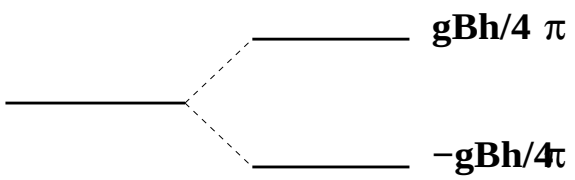
$$det\ \langle i|(\hat{H} - E)|j\rangle = \prod_n (E_n - E)^{d_n} = 0. \tag{4.1.26}$$

Pontosan annyi darab energiasajátértéket, ahány dimenziós az állapotok Hilbert-tere. Mindenegyes külöböző E_n energiasajátérték d_n-szer fordulhat elő, ahol $d_n \geq 1$ az adott energiasajátérték elfajultsági foka, az E_n energiájú állapotok alterének dimenziója. A különböző energiasajátértékekhez tartozó saját-alterek páronként ortogonálisak egymásra. Egy-egy elfajult energiasajátértékhez tartozó altéren belül mindig választhatunk ortonormált bázist. Legyen $\{|n, \alpha_n\rangle\}$ $(\alpha_n = 1, 2, \ldots, d_n)$ az így kapott ortonormált bázis a Hilbert-térben, ami a stacionárius Schrödinger-egyenlet független megoldásainak egy teljes rendszere. Akkor ebben a bázisban a Hamilton-operátor diagonális:

$$\langle n', \alpha_{n'}|\hat{H}|n, \alpha_n\rangle = E_n \delta_{n,n'} \delta_{\alpha_n, \alpha_{n'}}. \tag{4.1.27}$$

A stacionárius Schrödinger-egyenlet megoldása tehát a Hamilton-operátor mátrixának diagonalizálására vezethető vissza, mint matematikai feladat.

[39] Az állapotok tere 2-dimenziós, ezért 2×2-es mátrix determinánsának eltűnését kell megkövetelni.



3. ábra. Az $s = \frac{1}{2}$ spin energiaszintjének felhasadása sztatikus, homogén B indukciójú mágneses térben.

Energetikailag az a kedvezőbb, az az energiaskálán mélyebben fekvő állapot, amikor az elektron spinje beáll a mágneses térrel ellentétes irányba (azaz a mágneses momentuma beáll a mágneses indukcióval egyező irányba). Ez az elektron-spin alapállapota a külső mágneses térben.

Az impulzusmomentum négyzetének adott sajátértékéhez tartozó elfajult energiaszint külső mégneses tér hatására bekövetkező felhasadását **Zeeman-effektusnak**[40] nevezik és különösen fontos szerepet játszik az atomok szerkezetének vizsgálata során.

Példánkban az elektron forgásszimmetrikus rendszer, amíg be nem kapcsoljuk a külső mágneses teret. A forgásszimmetria következménye, hogy az elektron energiaszintje kétszeresen degenerált. A ,,fel-" ill. ,,lefelé" álló spinnel jellemzett elektronállapotok **multiplettet,** ún. dublettet alkotnak. Amikor bekapcsoljuk a külső mágneses teret, akkor megsértjük explicit módon az elektron forgásszimmetriáját, a külső homogén mágneses tér jelenlétében már csak a z-tengely körüli elforgatásokkal szembeni szimmetria marad meg. **A szimmetria ilyen, explicit megsértésének a következménye, hogy az elfajult energiaszint felhasadt, hogy a multiplett,** esetünkben a dublett **,,láthatóvá vált",** mint két különböző energiájú 'allapot. A szimmetria explicit megsértésének további fontos következménye, hogy most már csak a külsőmágneses tér irányában ,,fel-" ill. ,,lefelé" mutató spinű két állapot marad energia-saját 'allapot. Egy tetszőleges spinállapot általában nem energia-sajátállapot. Amíg a forgásszimmetria sértetlenül fennállt, addig a szabad spin esetén minden spinállapot energia-sajátállapot is volt.

Az elmondottakat nézhetjük másképp is. Ha nem tudnánk, hogy a szabad elektronspin energiaszintje kétszeresen elfajult, akkor a szimmetria explicit megsértése révén meg tudunk győződni arról, hogy volt ilyen szimmetria. Amikor egy szimmetria ilyen módon valósul meg, azt **a szimmetria Wigner-féle megvalósulási módjának** nevezzük.

[40]Hendrik Anton Lorentz (1853-1928, holland) és Pieter Zeeman (1865-1943, holland) 1902-ben fizikai Nobel-díjat kaptak eredményeikért, amelyeket annak kutatásában értek el, hogy amágnesség milyen hatást gyakorol a sugárzási jelenségekre.

4.1.3. Spin T ideig ható, homogén mágneses térben*

Vizsgáljuk most meg azt az esetet, hogy veszünk egy elektront, amely a kezdeti t_0 időpillanatban a

$$|\chi_0\rangle = \cos\frac{\alpha}{2}|+\rangle + \sin\frac{\alpha}{2}|-\rangle \tag{4.1.31}$$

spinállapotban van. Ez olyan állapot, amikor a spin várható értékének „vektora” az (x, z)-síkban fekszik és α szöget zár be a z-tengellyel (ld. a 4.1.1 fejezet apróbetűs részét). Kapcsoljuk be a $t = t_0$ pillanatban a z-tengely irányába mutató $B_z = |\vec{B}| > 0$ homogén mágneses teret, majd kérdezzük meg, hogy T idő elteltével milyen állapotban van az elektron[41].

Az elektron időtől függő $|\chi_T\rangle$ állapotvektorát az

$$\hat{U}(t_0 + T, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}T} \tag{4.1.32}$$

operátor állítja elő a t_0 pillanathoz tartozó kezdeti $|\chi_0\rangle$ állapotvektorból:

$$\begin{aligned}
|\chi_T\rangle &= \hat{U}(t_0 + T, t_0)|\chi_0\rangle \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}T}|\chi_0\rangle \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar}(a\hat{\vec{s}}^2 + g_s\hat{s}_z B_z)T}|\chi_0\rangle \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar}(a\hat{\vec{s}}^2 + g_s\hat{s}_z B_z)T}\left(\cos\frac{\alpha}{2}|+\rangle + \sin\frac{\alpha}{2}|-\rangle\right) \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{3a\hbar^2}{4}T}\left(e^{-i\frac{1}{2}g_s B_z T}\cos\frac{\alpha}{2}|+\rangle + e^{+i\frac{1}{2}g_s B_z T}\sin\frac{\alpha}{2}|-\rangle\right)
\end{aligned} \tag{4.1.33}$$

Mi történt a spinnel? Kezdetben a spin z-irányú vetületének várható értéke:

$$\begin{aligned}
\langle\chi_0|\hat{s}_z|\chi_0\rangle &= \frac{1}{2}\hbar\langle\chi_0|\left(\cos\frac{\alpha}{2}|+\rangle - \sin\frac{\alpha}{2}|-\rangle\right) \\
&= \frac{1}{2}\hbar\left(\cos^2\frac{\alpha}{2} - \sin^2\frac{\alpha}{2}\right) = \frac{1}{2}\hbar\cos\alpha.
\end{aligned} \tag{4.1.34}$$

Ez olyan, mintha a spin $\frac{1}{2}\hbar$ hosszúságú vektora α szöget zárna be a z-tengellyel. Ha T ideig hat a homogén mágneses tér, akkor annak hatására olyan állapot jön létre, amelyben a spin z-irányú vetülete:

$$\begin{aligned}
\langle\chi_T|\hat{s}_z|\chi_T\rangle &= \frac{1}{2}\hbar e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{3a\hbar^2}{4}T}\left\langle\chi_T\middle|\left(e^{-i\frac{1}{2}g_s B_z T}\cos\frac{\alpha}{2}|+\rangle - e^{+i\frac{1}{2}g_s B_z T}\sin\frac{\alpha}{2}|-\rangle\right)\right. \\
&= \frac{1}{2}\hbar\left(e^{+i\frac{1}{2}g_s B_z T}\cos\frac{\alpha}{2}\langle+| + e^{-i\frac{1}{2}g_s B_z T}\sin\frac{\alpha}{2}\langle-|\right)\left(e^{-i\frac{1}{2}g_s B_z T}\cos\frac{\alpha}{2}|+\rangle\right. \\
&\quad \left. -e^{+i\frac{1}{2}g_s B_z T}\sin\frac{\alpha}{2}|-\rangle\right) \\
&= \frac{1}{2}\hbar\left(\cos^2\frac{\alpha}{2} - \sin^2\frac{\alpha}{2}\right) \\
&= \frac{1}{2}\hbar\cos\alpha.
\end{aligned} \tag{4.1.35}$$

[41] A feladatban azt a módszert vázoljuk, amellyel az elektron spinjét előre meghatározott módon forgathatjuk a térben, ha az erre a célra használt mágneses teret megfelelően választott T idő eltelte után kikapcsoljuk.

A spin „vektora” tehát várható értékben továbbra is α szöget zár be a z-tengellyel.

A spin x és y irányú vetületének várható értéke kezdetben

$$\begin{aligned}
\langle\chi_0|\hat{s}_x|\chi_0\rangle &= \langle\chi_0|\hat{s}_x|\left(\cos\frac{\alpha}{2}|+\rangle + \sin\frac{\alpha}{2}|-\rangle\right) \\
&= \frac{1}{2}\hbar\langle\chi_0|\left(\cos\frac{\alpha}{2}|-\rangle + \sin\frac{\alpha}{2}|+\rangle\right) \\
&= \frac{1}{2}\hbar 2\sin\frac{\alpha}{2}\cos\frac{\alpha}{2} \\
&= \frac{1}{2}\hbar\sin\alpha, \\
\langle\chi_0|\hat{s}_y|\chi_0\rangle &= \langle\chi_0|\hat{s}_y|\left(\cos\frac{\alpha}{2}|+\rangle + \sin\frac{\alpha}{2}|-\rangle\right) \\
&= \frac{1}{2}\hbar i\langle\chi_0|\left(\cos\frac{\alpha}{2}|-\rangle - \sin\frac{\alpha}{2}|+\rangle\right) \\
&= \frac{1}{2}\hbar\left(\sin\frac{\alpha}{2}\cos\frac{\alpha}{2} - \sin\frac{\alpha}{2}\cos\frac{\alpha}{2}\right) = 0,
\end{aligned} \tag{4.1.36}$$

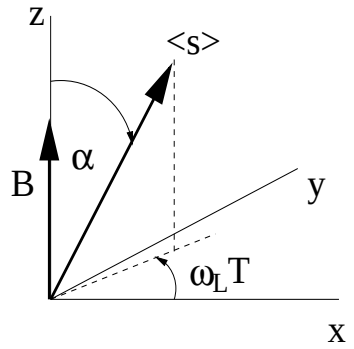
és T idő múlva

$$\begin{aligned}
\langle\chi_T|\hat{s}_x|\chi_T\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{3a\hbar^2}{4}T}\langle\chi_T|\hat{s}_x|\left(e^{-i\frac{1}{2}g_sB_zT}\cos\frac{\alpha}{2}|+\rangle + e^{+i\frac{1}{2}g_sB_zT}\sin\frac{\alpha}{2}|-\rangle\right) \\
&= \frac{1}{2}\hbar\langle\chi_T|\left(e^{-i\frac{1}{2}g_sB_zT}\cos\frac{\alpha}{2}|-\rangle + e^{+i\frac{1}{2}g_sB_zT}\sin\frac{\alpha}{2}|+\rangle\right) \\
&= \frac{1}{2}\hbar\left(e^{+ig_sB_zT} + e^{-ig_sB_zT}\right)\sin\frac{\alpha}{2}\cos\frac{\alpha}{2} \\
&= \frac{1}{2}\hbar\cos(g_sB_zT)\sin\alpha, \\
\langle\chi_T|\hat{s}_y|\chi_T\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{3a\hbar^2}{4}T}\langle\chi_T|\hat{s}_y|\left(e^{-i\frac{1}{2}g_sB_zT}\cos\frac{\alpha}{2}|+\rangle + e^{+i\frac{1}{2}g_sB_zT}\sin\frac{\alpha}{2}|-\rangle\right) \\
&= \frac{1}{2}\hbar i\langle\chi_T|\left(e^{-i\frac{1}{2}g_sB_zT}\cos\frac{\alpha}{2}|-\rangle - e^{+i\frac{1}{2}g_sB_zT}\sin\frac{\alpha}{2}|+\rangle\right) \\
&= \frac{1}{2}\hbar i\left(-e^{+ig_sB_zT} + e^{-ig_sB_zT}\right)\sin\frac{\alpha}{2}\cos\frac{\alpha}{2} \\
&= \frac{1}{2}\hbar\sin(g_sB_zT)\sin\alpha.
\end{aligned} \tag{4.1.37}$$

Ebből azt látjuk, hogy a spin várható értékének „vektora” a z-tengellyel ugyan állandó szöget zár be, de a z-tengelyre merőleges vetülete $\omega_P = g_sB_z$ állandó szögsebességgel forog az (x, y)-síkban az origó körül. A spin a külső, homogén mágneses tér hatására ún. **Larmor[42]-precessziót** végez.

[42]Sir Joseph Larmor (1857-1942, ír) fizikus. A legkisebb hatás elvének egyik hirdetője. Még mielőtt J.J. Thomson 1897-ben felfedezte az elektront, Larmor felismerte, hogy az elektromos töltés egyetlen forrása egy részecske, és hogy az elektromos áram egyedüli oka sok ilyen részecske áramlása.

Joseph John Thomson (1856-1940, angol) 1906-ban fizikai Nobel-díjat kapott a gázok elektromos vezetésére vonatkozó elméleti és kísérleti vizsgálatában szerzett nagy érdemeiért.



4. ábra. Az $s = \frac{1}{2}$ spin Larmor-precessziója sztatikus, homogén B indukciójú mágneses térben.

A megfelelő klasszikus fizikai kép az, hogy a $\vec{\mu}$ mágneses momentummal rendelkező ,,pörgettyűre a homogén külső mágneses tér $\vec{M} = \vec{\mu} \times \vec{B}$ forgatónyomatékot fejt ki, amely merőleges a mágneses momentumra és a mágneses indukció vektorára egyaránt, s így nincsen z-irányú komponense. A klasszikus $\vec{\mu} = -g\vec{l}$ mágneses momentum, ill. a hozzá tartozó $\vec{l}$ impulzusmomentumú, pontszerű merev test mozgásegyenlete, az impulzusmomentum tétele alapján:

$$\frac{d\vec{l}}{dt} = \vec{M}, \quad \Rightarrow \quad \frac{d\vec{l}}{dt} = -g\vec{l} \times \vec{B} \equiv -\vec{\omega} \times \vec{l}, \tag{4.1.38}$$

ahol $\vec{\omega} = g\vec{B}$ állandó, a z-tengely (a homogén mágneses tér indukciója) irányába mutató vektor. Mivel $M_z = 0$, ezért az impulzusmomentum z-irányú komponense megmarad, l_z =áll. A mozgásegyenletből adódik, hogy

$$\frac{d\vec{l}^2}{dt} = 2\vec{l} \cdot \frac{d\vec{l}}{dt} = -2\vec{l} \cdot (\vec{\omega} \times \vec{l}) = 0, \tag{4.1.39}$$

azaz a mozgás során az impulzusmomentum négyzete állandó. A forgatónyomaték hatására a pörgettyű úgy kényszerül mozogni, hogy ne sértse az impulzusmomentum z-irányú komponensének a megmaradását, miközben a nagysága sem változik. Ennek következtében az impulzusmomentum vektora forog a z-tengely körül, $\vec{\omega} = g\vec{B}$ szögsebességgel precesszál (ld. a 4. ábrát).

A homogén, sztatikus külső mágneses térbe helyezett elektron spin-vektorának várható értéke a kvantummechanikában hasonlóan viselkedik mint egy súlyos pörgettyű impulzusmomentum-vektora: állandó szögsebességgel precesszál a mágneses indukció vektorának iránya körül. A precesszió szögsebessége a kvantummechanikában is $g_s|\vec{B}|$ nagyságú. Az elektron mágneses momentuma és spinje közötti arányossági tényező a tapasztalat szerint (Einstein és de Haas kísérletének eredményei alapján, ld. a A.1.4 függeléket) $g_s = \frac{|e|}{m_e c}$, ahol m_e az elektron nyugalmi tömege, c pedig a fény sebessége a vákuumban. Ez az érték 2−szerese a $g = \frac{|e|}{2m_e c}$ arányossági tényezőnek, ami az elektron pályaimpulzusmomentumából származó mágneses momentumban szerepel. Az elektron pályamozgásához tartozó g giromágneses tényezőnek egyszerű klasszikus fizikai magyarázata van annak alapján, hogy pl. R sugarú körpályán, v=áll. kerületi sebességgel mozgó elektron pályaimpulzusmomentuma $\ell_z = Rm_e v$, az általa képviselt áram $i = -|e|\frac{v}{2\pi R}$, és a köráram mágneses dipólmomentuma $\mu_z = \frac{1}{c} i R^2 \pi$, úgyhogy

$$\mu_z = -\frac{|e|v}{2\pi Rc} R^2 \pi = -\frac{|e|}{2\pi R^2 m_e c} R^2 \pi \ell_z = -\frac{|e|}{2m_e c} \ell_z. \tag{4.1.40}$$

Nagyjából hasonló nagyarázatot kapunk a kvantummechanika keretében is. Ezt majd akkor beszéljük meg, amikor a hidrogén-atom gerjesztett állapotainak tulajdonságait tárgyaljuk. Ugyanakkor az elektron spinjéhez tartozó giromágneses tényezőt csak a kvantumtérelmélet eszközeivel, a kvantumelektrodinamika keretében tudjuk megmagyarázni, mert az relativisztikus effektussal kapcsolatos.

4.2. Pontrészecske mozgása

Ebben a fejezetben a pontrészecske térbeli mozgásának speciális eseteivel fogunk foglalkozni. Az első feladat az, hogy keressük meg a pontrészecske Hamilton-operátorának az alakját. Miután tanulmányozzuk a szabad részecske mozgását, tárgyalni fogjuk a részecske mozgását külső potentciál jelenlétében. Végezetül a hidrogén-atommal foglalkozunk, mint az atommag (az adott esetben a proton) Coulomb-terében mozgó elektron esetével. Vonatkoztatási rendszernek inerciarendszert választunk, azaz olyan rendszert, amelyből nézve a tér homogén és izotróp, az idő pedig homogén. Ehrenfest első tételéből tudjuk, hogy inerciarendszerben a részecske helyzetvektora operátorának várható értéke az idő lineáris függvénye, azaz a részecske helyzetvektorának várható értéke olyan vektor, amelynek ,,hegye" egyenesvonalú egyenletes mozgást végez.

4.2.1. Belső szabadsági fokok nélküli részecske Hamilton-operátora

Tegyük fel, hogy a részecske a térbeli helyzetén és impulzusán kívül semmilyen más, ún. belső szabadsági fokkal, mint pl. a zérustól különböző spin, nem rendelkezik. Ekkor a klasszikus mechanikai Hamilton-függvény alakja és a megfeleltetési elv van segítségünkre abban, hogy megtaláljuk a részecske Hamilton-operátorát. Általánosan feltehetjük, hogy a részecske Hamilton-operátora a kinetikus energia $\hat{T}$ és a potenciális energia $\hat{V}$ operátorának az összege:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}. \tag{4.2.1}$$

Ha elvégezzük a Heisenberg-féle kanonikus kvantálást, azaz a Heisenberg-féle cserelćiókt előírjuk, és a klasszikus helyzetvektort és impulzust a megfelelő operátorokra cseréljük, akkor a következő alakban kapjuk meg rendre a kinetikus energia és a potenciális energia operátorát:

$$\hat{T} = \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m}, \qquad \hat{V} = V(\hat{\vec{r}}). \tag{4.2.2}$$

A belső szabadsági fokok nélküli részecske Hamilton-operátora tehát:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m} + V(\hat{\vec{r}}). \tag{4.2.3}$$

Koordináta-reprezentációban ez az operátor

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \tag{4.2.4}$$

alakot ölt. Ennek megfelelően a pontrészecske koordináta-hullámfüggvényére vonatkozó Schrödinger-egyenlet

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r},t) \tag{4.2.5}$$

alakú. A Schrödinger-egyenlet parciális differenciál-egyenlet, amely az időváltozó tekintetében első- a koordináták tekintetében másodrendű, lineáris, parciális differenciálegyenlet. Következésképpen egyértelműen létezik a megoldása, ha

1. **adott a hullámfüggvényre vonatkozó térbeli határfeltételek, pl. a hullámfüggvény értéke a térbeli értelmezési tartománya határain;**
2. **adott a határfeltételeket kielégítő kezdőfeltétel, azaz a hullámfüggvény a $t = t_0$ kezdeti időpillanatban.**

A megoldás ekkor az időváltozóban legalább egyszer, a koordinátákban legalább kétszer differenciálható hullámfüggvény. Ennek következménye, hogy a megoldás folytonos és egyszer folytonosan differenciálható a térváltozók tekintetében.

Ha a pontrészecske az x-tengely mentén egy-dimenziós mozgást végez, akkor a Schrödinger-egyenlet az alábbi alakra egyszerűsödik:

$$i\hbar\partial_t\psi(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)\right]\psi(x,t). \tag{4.2.6}$$

4.2.2. Nem zérus spinű részecske Hamilton-operátora*

Várakozásunk az, hogy mindaddig, amíg a részecske spinje nem vesz részt a kölcsönhatásokban, addig a Hamilton-operátor alakja lényegében ugyanaz marad, mint a zérus spinű részecske esetén.

A nem zérus spinű részecske állapottere a térbeli állapotok $\mathcal{H}_r$ terének és a spinállapotok $\mathcal{H}_s$ terének tenzori szorzata. A részecske állapotterét olyan szeparábilis állapotok feszítik ki, amelyek a térbeli állapot és a spinállapot tenzori szorzatai. Következésképpen, a részecske hullámfüggvénye a koordinátahullámfüggvény és a spinhullámfüggvény szorzata, ill. ilyen szorzatok lineáris kombinációja. A hullámfüggvény tehát általában az $\vec{r}$ helyzetvektornak és a részecske σ spinváltozójának a négyzetesen integrálható függvénye.

Vegyük pl. **az $\frac{1}{2}$-spinű elektront.** Korábban láttuk, hogy bevezethető 2 bázisállapot a spinállapotok terében, amelyek az $\hat{s}_z$ spinvetület $\pm\frac{1}{2}\hbar$ sajátértékeihez tartoznak, ezek hullámfüggvényei 2-komponensűek, $\chi_\sigma^{[\pm]} = \delta_{\sigma,\pm\frac{1}{2}}$, úgyhogy

$$\frac{1}{2}\hat{s}_z\chi_\sigma^{[\pm]} = \pm\frac{1}{2}\hbar\chi_\sigma^{[\pm]}. \tag{4.2.7}$$

Mivel az elektron hullámfüggvénye a σ diszkrét változónak is függvénye, ezért azt is mondhatjuk, hogy az elektron hullámfüggvényének 2 komponense van, amelyeket 2-elemű számoszlopban rendezhetünk el:

$$\Psi \equiv \begin{pmatrix}\Psi_+\\ \Psi_-\end{pmatrix} = \Psi_+(\vec{r})\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \Psi_-(\vec{r})\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}. \tag{4.2.8}$$

Az állapot normálási feltétele:

$$1 = \int d\vec{r}\sum_{\sigma=\pm\frac{1}{2}}|\Psi(\vec{r},\sigma)|^2 = \int d\vec{r}\Big(|\Psi_+(\vec{r})|^2 + |\Psi_-(\vec{r})|^2\Big). \tag{4.2.9}$$

Speciális esetek:

1. *Ha az elektron spinje és térbeli mozgása között semmilyen kölcsönhatás nincsen és az elektron spinje semmilyen külső térrel sem hat kölcsön,* akkor az elektron Hamilton-operátora,

$$\hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\otimes\hat{1}_s \tag{4.2.10}$$

a spinállapotok terén $\hat{1}_s$ egység-operátorként hat. Ilyenkor az elektron stacionárius állapotaiban a hely- és a spinfüggés szeparálható. Az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldása pedig megőrzi a kezdeti feltétel szeparált alakját:

$$\Psi_s(\vec{r};t) = \psi(\vec{r};t)\chi_\sigma(t). \tag{4.2.11}$$

Ekkor a Schrödinger-egyenlet megoldása során el is felejtkezhetünk a spinről, hiszen a spinállapot a mozgás során nem fog megváltozni, $\partial_t\chi_\sigma(t) = 0$ miatt $\chi_\sigma(t) = \chi_\sigma(t_0)$, a térbeli hullámfüggvény pedig ugyanúgy változik az időben, mintha a részecskének nem is lenne spinje:

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{r};t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r};t). \tag{4.2.12}$$

2. *Ha az elektron térbeli mozgása elhanyagolható, vagy nem érdekes, a spinje azonban kölcsönhat homogén külső mágneses térrel,* akkor az elektron Hamilton-operátora,

$$\hat{H} = \hat{1}_{\vec{r}}\otimes\hat{H}_s \tag{4.2.13}$$

a koordináta-hullámfüggvények $\mathcal{H}_r$ terén hat $\hat{1}_r$ egységoperátorként. Itt $\hat{H}_s = a\hat{\vec{s}}^2 + g_s\hat{\vec{s}}\cdot\vec{B}$ az előző fejezetben diszkutált Hamilton-operátor, ahol g_s a spin és a mágneses momentum közötti arányossági tényező. Rendszerint az $a = 0$ választással szoktunk élni, azaz a szabad elektronnak a spinjéből származó saját energiáját nem szoktuk hozzáadni az elektron energiájához. Ez azért is indokolt, mert a kvantummechanika keretei között ennek a sajátenergiának a meghatározására nincsen lehetőségünk.

3. *Az elektron pályaimpulzusmomentumához és spinjéhez is tartozik mágneses dipólmomentum, ha ezek külső mágneses térrel hatnak kölcsön,* akkor az elektron Hamilton-operátora

$$\hat{H} = \hat{H}_0 \otimes \hat{1}_s + g_l \vec{B} \cdot (\hat{\vec{\ell}} \otimes \hat{1}_s + 2\hat{1}_{\vec{r}} \otimes \hat{\vec{s}}) \tag{4.2.14}$$

ahol $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta + V(r)$ az elektron Hamilton-operátora $V(r)$ centrális potenciálban és a kölcsönhatást a külső mágneses térrel a Hamilton-operátor második tagja írja le. Utóbbiban felhasználtuk, hogy a spin giromágneses együtthatója a pályaimpulzusmomentum kétszerese, $g_s = 2g_l$. Az elektron pályaimpulzusmomentumától és spinjétől származó mágneses dipólmomentumoknak a homogén külső mágneses térrel történő kölcsönhatása okozza a Zeeman-effektust, az atomi energiaszintek m_ℓ és m_s szerinti felhasadását. Valóban a fenti $\hat{H}$ Hamilton-operátor felcserélhető $\hat{\vec{\ell}}^2$, $\hat{\vec{s}}^2$, $\hat{\ell}_z$ és $\hat{s}_z$ operátorokkal, ahol a z-tengely a homogén külső mágneses tér irányába mutat. Így az atomi energiaszintek a külső mágneses térben az E energia mellett az ℓ, m_ℓ és m_s kvantumszámokkal jellemezhetők. A kölcsönhatási energia $\Delta E = g_l B(m_\ell + 2m_s)$, ami azt jelenti, hogy adott E-vel és ℓ-lel jellemzett állapot energiája a mágneses tér hatására felhasad m_ℓ és m_s értékétől függően.

4. *Az elektron spinje és térbeli mozgása közötti kölcsönhatás* egyik példája a tapasztalat szerint az úgynevezett **spin-pálya kölcsönhatás,** amelynek Hamilton-operátora

$$\hat{H}_{\text{s.p.}} = -f(\vec{r}) \sum_{j=1}^{3} \hat{\ell}_j \otimes \hat{s}_j, \tag{4.2.15}$$

amelyet röviden csak

$$\hat{H}_{\text{s.p.}} = -f(\vec{r})\hat{\vec{\ell}} \cdot \hat{\vec{s}} \tag{4.2.16}$$

alakban szoktunk írni, ahol $f(\vec{r})$ csak a helyzetvektortól függő függvény. A tapasztalat szerint ilyen kölcsönhatás fellép az atomi elektron pályamomentuma és spinje között.

A klasszikus fizikai kép azt sugallja, hogy mind az elektron pályamozgásához, mindpedig a spinjéhez tartozik mágneses momentum, és azok, mint mágneses dipólusok kölcsönhatnak egymással. A spin-pálya kölcsönhatás kvantumfizikai magyarázatát csak a speciális relativitási elvet és a kvantumfizikát ötvöző kvantumtérelmélet, pontosabban a kvantumelektrodinamika keretében találták meg.

Az $\hat{\vec{\ell}} \cdot \hat{\vec{s}}$ operátor a $\hat{\vec{j}} = \hat{\vec{\ell}} + \hat{\vec{s}}$ teljes impulzusmomentum segítségével

$$\hat{\vec{\ell}} \cdot \hat{\vec{s}} = \frac{1}{2}[\hat{\vec{j}}^2 - \hat{\vec{\ell}}^2 - \hat{\vec{s}}^2] \tag{4.2.17}$$

alakba írható. Innen látjuk, hogy $\hat{H}_{\text{s.p.}}$ felcserélhető a $\hat{\vec{j}}^2$, $\hat{\vec{\ell}}^2$ és $\hat{\vec{s}}^2$ operátorokkal. Ugyanakkor $\hat{j}_z$ is felcserélhető az utóbbi operátorokkal és a spin-pálya kölcsönhatás Hamilton-operátorával. Másrészt viszont $\hat{\ell}_z$ és $\hat{s}_z$ nem felcserélhetők a $\hat{\vec{j}}^2$ operátorral, s így $\hat{H}_{\text{s.p.}}$-val sem. Centrálszimmetrikus potenciálban mozgáo elektront feltételezve, $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{s.p.}}$, ahol $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta + V(r)$, a spin-pálya kölcsönhatás azt eredményezi, hogy az energiaszinteket az E, j, ℓ, $s = \frac{1}{2}$ kvantumszámokkal lehet jellemezni, minden energiaszint $(2j+1)$-szeresen elfajult m_j lehetséges értékeinek megfelelően. A spin-pálya kölcsönhatás miatti energiafelhasadás

$$\Delta E = -\frac{1}{2}\hbar^2 f(r)\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}\right] \tag{4.2.18}$$

A spin-pálya kölcsönhatás következtében az atomi spektrumokban, a „spektrumvonalak" multiplettekre történő felhasadását, a spektrum-vonalak úgynevezett finom szerkezetét lehet megfigyelni.

Ehhez hasonló az úgynevezett **hiperfinom felhasadás**, ami azért lép fel, mert az atomi elektron pályaimpulzusmomentuma és az atommag spinje is kölcsönhat egymással. Mivel az elektron-spin giromágneses együtthatója, g_s és az atommag (hidrogén-atom esetében a proton) spinjének giromágneses tényezője, g_p között

$$g_p \sim g_s \mathcal{O}(\frac{m_e}{m_p}) \tag{4.2.19}$$

nagyságrendi reláció áll fenn, ahol m_e, ill. m_p rendre az elektron, ill. a proton nyugalmi tömege, és hányadosuk $\frac{m_e}{m_p} \sim \frac{1}{2000}$, azért a hiperfinom szerkezetben az energianívók távolsága kb. 3 nagyságrenddel kisebb, mint a finomszerkezetben.

4.2.3. Szabad részecske mozgása inerciarendszerben

Zérus spinű szabad részecske Hamilton-operátora inerciarendszerben

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m}. \tag{4.2.20}$$

Ezért koordináta-reprezentációban a szabad részecske Schrödinger-egyenlete:

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t). \tag{4.2.21}$$

Az időfüggő Schrödinger-egyenletnek a megoldása akkor egyértelmű, ha megadjuk, hogy milyen határfeltételeket és milyen kezdeti feltételt kielégítő megoldást keresünk. A fizikai feladat megoldását olyan hullámfüggvények között kell keressük, amelyek az $\vec{r} \to \infty$ térbeli végtelenben elég gyorsan eltűnnek ahhoz, hogy a hullámfüggvény négyzetesen integrálható legyen, azaz az

$$\int dV|\psi(\vec{r},t)|^2 \tag{4.2.22}$$

integrál véges legyen. Tegyük fel, hogy kezdőfeltételként adott egy ilyen határfeltételeket kielégítő és 1-re normált hullámfüggvény a $t = t_0$ pillanatban: $\psi(\vec{r},t_0) = f(\vec{r})$, amelyre tehát $\int dV|f(\vec{r})|^2 = 1$. Keressük meg a hullámegyenlet ezen kezdeti feltételhez tartozó megoldását!

A következők szerint járunk el:

1. Megoldjuk a szabad részecske Hamilton-operátorának sajátérték-egyenletét. Tulajdonképpen ez nem új feladat, mert a szabad részecske Hamilton-operátora az impulzus operátorából van megalkotva, s ezért az impulzus operátorának sajátfüggvényei egyúttal a Hamilton-operátornak is sajátfüggvényei:

$$\begin{aligned} \hat{\vec{p}}\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) &= \vec{p}\psi_{\vec{p}}(\vec{r}), \\ \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m}\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) &= \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}\psi_{\vec{p}}(\vec{r}), \end{aligned} \tag{4.2.23}$$

ahol a sajátfüggvények:

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \prod_{j=1}^{3} \psi_{p_j}(r_j) = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \tag{4.2.24}$$

nem fizikai állapotok, mert a normájuk végtelen, de ortonormált teljes rendszert alkotnak a

$$\int dV \psi_{\vec{p}\,'}{}^{*}(\vec{r})\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = (2\pi\hbar)^3\delta(\vec{p}-\vec{p}\,') \tag{4.2.25}$$

általánosított ortonormáltsági relációkkal. Megjegyezzük, hogy egy ilyen, jól definiált impulzussal rendelkező ,,állapotban" az impulzus bizonytalansága zérus, míg a helykoordináta bizonytalansága végtelen.

2. Ez azt jelenti, hogy tetszőleges $\psi(\vec{r},t)$ hullámfüggvény kifejthető ezen teljes rendszer szerint

$$\psi(\vec{r},t) = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} C(\vec{p},t)\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) \tag{4.2.26}$$

alakban, ahol nyilvánvalóan a $C(\vec{p},t)$ lineárkombinációs együtthatók hordozzák az időfüggést. A kezdeti feltételt jelentő $f(\vec{r})$ hullámfüggvény ugyancsak kifejthető az impulzus sajátfüggvényei szerint,

$$f(\vec{r}) = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} C_0(\vec{p})\psi_{\vec{p}}(\vec{r}), \tag{4.2.27}$$

ahol a lineárkombinációs együtthatók jelentik a $C(\vec{p},t)$ együttható-függvényekre vonatkozó kezdeti feltételeket:

$$C(\vec{p},t_0) = C_0(\vec{p}) = \int dV \psi^{\star}_{\vec{p}}(\vec{r}) f(\vec{r}) = \int dV e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} f(\vec{r}). \tag{4.2.28}$$

3. Helyettesítsük be a hullámfüggvény impulzus-sajátfüggvények szerinti kifejtését a Schrödinger-egyenletbe:

$$i\hbar \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \partial_t C(\vec{p},t)\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} C(\vec{p},t)\frac{\vec{p}^2}{2m}\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) \tag{4.2.29}$$

adódik. Szorozzuk az egyenlet mindkét oldalát $\psi^{*}_{\vec{q}}(\vec{r})$ függvénnyel és integráljuk a teljes térre:

$$i\hbar\partial_t C(\vec{q},t) = \frac{\vec{q}^2}{2m} C(\vec{q},t) \tag{4.2.30}$$

Látjuk, hogy a $C(\vec{q},t)$ együtthatók időfüggését meghatározó differenciál-egyenletrendszert kaptunk, amely azonban szerencsésen szétcsatolódott a $\vec{q}$ impulzus különböző

értékeihez tartozó együtthatók tekintetében. A kezdeti feltételeket is kielégítő megoldás:

$$C(\vec{q},t) = C_0(\vec{q})e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{q}^2}{2m}(t-t_0)} \tag{4.2.31}$$

A szabad részecske adott kezdeti feltételhez tartozó mozgását tehát a

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{r},t) &= \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} C_0(\vec{p}) e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t-t_0)} \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) \\
&= \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} C_0(\vec{p}) e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t-t_0)+\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{r}\,' \int d\vec{p} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t-t_0)+\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')} f(\vec{r}\,') \\
&= \left(\frac{m}{i2\pi\hbar(t-t_0)}\right)^{3/2} \int d\vec{r}\,' f(\vec{r}\,') \exp\left\{ i\frac{m(\vec{r}-\vec{r}\,')^2}{2\hbar(t-t_0)} \right\}
\end{aligned} \tag{4.2.32}$$

hullámfüggvény írja le.

4.2.4. A hullámcsomag szétfolyása

Vegyük azt az egyszerű példát, amikor a kezdeti állapotban az impulzus csaknem jól definiált $\vec{P}$ értékkel rendelkezik: az impulzus várható értéke $\vec{P}$ és a relatív szórása nagyon kicsi. Ilyen állapotot ír le az olyan hullámcsomag, amelyben a különböző impulzusú sajátfüggvények amplitudója

$$C_0(\vec{p}) = c_0 e^{-\frac{(\vec{p}-\vec{P})^2}{2\sigma^2}}, \tag{4.2.33}$$

ahol a σ paraméter kellően kicsiny értéke azt jelenti, hogy a hullámfüggvényben kicsiny amplitudóval vannak csak jelen $\vec{P}$-től különböző impulzusú komponensek. Kb. ilyen alakú egy gyorsítóval előállított, ,,jól definiált" impulzusú részecske hullámfüggvénye. Az impulzus négyzetes szórása ekkor $\sim \sigma^2$. Számoljuk ki $t-t_0$ idő múlva a hullámfüggvényt:

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{r},t) &= (2\pi\hbar)^{-3} c_0 \int d\vec{p} e^{-\frac{(\vec{p}-\vec{P})^2}{2\sigma^2} - \frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t-t_0)+\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \\
&\propto A'(t-t_0) \exp\left\{ -\frac{1}{2} \frac{\left[\frac{\vec{P}}{\sigma^2} + \frac{i}{\hbar}\vec{r}\right]^2}{\frac{1}{\sigma^2} + \frac{i(t-t_0)}{\hbar m}} \right\} \\
&\propto A(t-t_0) \exp\left\{ -\frac{1}{2} \frac{\left[\vec{r} - \frac{\vec{P}}{m}(t-t_0)\right]^2}{\left[\frac{\hbar^2}{\sigma^2} + \frac{\sigma^2(t-t_0)^2}{m^2}\right]} \right\},
\end{aligned} \tag{4.2.34}$$

ahol $A'(t-t_0)$ ill. $A(t-t_0)$ az eltelt időtől függő komplex amplitudók, amelyek $t-t_0 \to \infty$ esetén abszolut értékben $(t-t_0)^{-3/2}$ szerint csökkennek. **A hullámfüggvény alakjából egyrészt azt olvassuk ki, hogy a hullámcsomag középpontja (azaz a hullámüggvény abszolut értéke négyzetének a maximumhelye) az**

$$\vec{r} = \frac{\vec{P}}{m}(t-t_0) \tag{4.2.35}$$

egyenlet szerint egyenes vonalú egyenletes mozgást végez állandó $\vec{V} = \frac{\vec{P}}{m}$ sebességgel. Másrészt hosszú idő után a hullámcsomag maximumának abszolut értéke csökken, miközben a hullámcsomag térbeli félszélessége a $\frac{\hbar}{\sigma}$ értékről szigorúan monoton nő a

$$\frac{\hbar}{\sigma'} = \frac{\hbar}{\sigma}\left[1 + \frac{\sigma^4(t-t_0)^2}{\hbar^2 m^2}\right]^{1/2} \tag{4.2.36}$$

értékre. A kezdetben $\frac{\hbar}{\sigma}$ méretű térbeli tartományra lokalizált hillámcsomag tehát az idő múltával szétfolyik.

A hullámcsomag által leírt részecske impulzusa Descartes-komponenseinek

$$\Delta p_i = \sqrt{\overline{\hat{p}_i^2} - (\overline{\hat{p}_i})^2} = \sigma \tag{4.2.37}$$

szórása nem változik időben, míg a részecske helykoordinátáinak bizonytalansága $\Delta x_i = \hbar/\sigma'$ szigorúan monoton növekszik az eltelt idő függvényében, és

$$\Delta p_i \Delta x_i = \frac{\hbar\sigma}{\sigma'} = \hbar\left[1 + \frac{\sigma^4(t-t_0)^2}{\hbar^2 m^2}\right]^{1/2} \geq \hbar \tag{4.2.38}$$

alakban teljesül a Heisenberg-féle határozatlansági reláció.

4.2.5. Ehrenfest tétele. Newton törvényei?

Vizsgáljuk meg, hogy a kvantummechanikában érvényben maradnak-e Newton törvényei valamilyen általánosított alakban. **Newton[43] I. törvénye az inerciarendszer létezését mondja ki. Az inerciarendszer olyan vonatkoztatási rendszer, amelyből nézve a tér homogén és izotróp, az idő pedig homogén.** Az inerciarendszer megkeresésének operatív módja ezért az, hogy meg kell vizsgálni, vajon a pontszerű részecske megőrzi-e nyugalmi állapotát, ill. egyenesvonalú egyenletes mozgását, ha nem áll semmilyen más testtel kölcsönhatásban.

[43]Isaac Newton (1642-1727, angol) kidolgozta a mechanika mai napig is helyes elméletét, amelynek sarokkövét a róla elnevezett mozgástörvények és a gravitációs vonzás törvénye képezi. A centripetális erő magyarázata is tőle származik. Kidolgozta a színelméletet. Legfontosabb matematikai eredményei a binomiális tétel és a differenciálszámítás alapjainak kidolgozása.

A kvantummechanikában az inerciarendszer megkeresése annak alapján történhet, hogy inerciarendszerben a csaknem jól definiált impulzusú és térben is csaknem lokalizált részecskét leíró hullámcsomag abszolut értéke négyzetének maximumhelye egyenesvonalú egyenletes mozgást végez. Ez így nem túl működőképes mód arra, hogy eldöntsük, vajon az adott vonatkoztatási rendszer inerciarendszer vagy sem. Egyrészt az inerciarendszer ilyen módon történő megkeresése a szabad részecskére vonatkozó időtől függő Schrödinger-egyenletnek egy speciális kezdőfeltételhez tartozó megoldásához kötődik. Másrészt a hullámcsomag abszolut értéke négyzetének maximumhelyét nem lehet közvetlenül mérni.

Általános, tetszőleges állapotra érvényes állításokat is kaphatunk, ha az impulzus operátora várható értékének idő szerinti első deriváltját vizsgáljuk. Értelmezése szerint a

$$\dot{\hat{\vec{p}}} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{\vec{p}}, \hat{H}] \tag{4.2.39}$$

operátor az az operátor, amelynek várható értéke tetszőleges $|\psi(t)\rangle$ állapotban megadja az impulzus operátora várható értékének idő szerinti első deriváltját ugyanebben az állapotban:

$$\langle\psi(t)|\dot{\hat{\vec{p}}}|\psi(t)\rangle = \frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\hat{\vec{p}}|\psi(t)\rangle. \tag{4.2.40}$$

Mivel inerciarendszerben a pontrészecske Hamilton-operátora általában

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m} + V(\vec{r}) \tag{4.2.41}$$

alakú, azért a $\dot{\hat{\vec{p}}}$ operátor tetszőleges $\psi(\vec{r},t)$ hullámfüggvényre az alábbiak szerint hat:

$$\begin{aligned}
\dot{\hat{\vec{p}}}\psi(\vec{r},t) &= -\frac{i}{\hbar}[\hat{\vec{p}}, \hat{H}]\psi(\vec{r},t) = -\frac{i}{\hbar}[\hat{\vec{p}}, \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m} + V(\vec{r})]\psi(\vec{r},t) \\
&= -\frac{i}{\hbar}[\hat{\vec{p}}, V(\vec{r})]\psi(\vec{r},t) = -\vec{\nabla}\Big[V(\vec{r})\psi(\vec{r},t)\Big] + V(\vec{r})\Big[\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t)\Big] \\
&= -\Big[\vec{\nabla}V(\vec{r})\Big]\psi(\vec{r},t) - V(\vec{r})\Big[\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t)\Big] + V(\vec{r})\Big[\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t)\Big] \\
&= -\Big[\vec{\nabla}V(\vec{r})\Big]\psi(\vec{r},t).
\end{aligned} \tag{4.2.42}$$

Írhatjuk tehát, hogy

$$\dot{\hat{\vec{p}}} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{\vec{p}}, \hat{H}] = -\vec{\nabla}V(\vec{r}). \tag{4.2.43}$$

Innen leolvashatjuk **Ehrenfest**[44] **tételeit:**

[44]Paul Ehrenfest (1880-1933, osztrák) fizikus, az adiabatikus invariánsok hipotézisének fel 'állításával jelentősen hozzájárult az atomfizika fejlődéséhez. Statisztikus fizikai megfontolásai beépültek a modern, nem egyensúlyi termodinamikába.

1. **Ha a részecskére nem hatnak más testek (azaz $V(\vec{r}) = 0$), akkor a részecske impulzusa inerciarendszerben megmaradó mennyiség. Inerciarendszerben tehát a szabadon mozgó részecske impulzusának várható értéke állandó. Ennek alapján dönthetjük el, hogy egy vonatkoztatási rendszer inerciarendszer vagy sem.**

2. **Ha a részecskére külső, sztatikus potenciáltér által kifejtett $\vec{F} = -\vec{\nabla}V(\vec{r})$ erő hat, akkor a részecske impulzusa várható értékének az idő szerinti első deriváltja megegyezik az $\vec{F} = -\vec{\nabla}V(\vec{r})$ erő várható értékével, akármilyen állapotban is legyen a részecske, azaz várható értékben érvényes Newton II. törvénye.**

4.2.6. Mikor végez a részecske a klasszikus mechanikaira emlékeztető mozgást?*

Látjuk tehát, hogy Newton második törvénye Ehrenfest második tételének alakjában érvényes a kvantummechanikában is. Legyünk azonban óvatosak a tétel következményeinek megítélésében. Ez a tétel még egyáltalán nem jelenti, hogy a kvantummechanikai mozgás általában bármiben is emlékeztetne az ugyanolyan potenciálban történő klasszikus mechanikai mozgásra. **Ahhoz, hogy a részecske mozgása közelítőleg emlékeztessen a klasszikus mozgásra, több feltételnek is teljesülnie kell. Az egyik feltétel az, hogy a potenciál gradiensének várható értéke közelítőleg egyezzen meg a potenciál gradiensének értékével a részecske helyzetvektorának várható értékénél. Ehhez természetesen térben erősen lokalizált hullámcsomaggal leírható állapotban kell előállítanunk a részecskét.** Ha azonban a részecske térben lokalizált, akkor megnő a határozatlansági elv szerint az impulzusbizonytalansága: $\Delta p_x \gtrsim \frac{\hbar}{\Delta x}$. Ekkor a részecske kinetikus energiájának várható értékéhez

$$\overline{\frac{\vec{p}_x^2}{2m}} = \frac{\overline{p}_x^2}{2m} + \frac{[\Delta p_x]^2}{2m} \tag{4.2.44}$$

az impulzus szórásából adódó $\frac{[\Delta p_x]^2}{2m}$ járulék nagyon nagy lehet. **Annak a másik feltétele, hogy a mozgás a klasszikus mechanikaihoz legyen hasonló, az, hogy a kvantumfluktuációk járuléka maradjon kicsi a kinetikus energia várható értékében.** A kinetikus energia várható értékében tehát az impulzus várható értékéből számolt kinetikus energiának kell dominálnia:

$$\frac{\overline{p}_x^2}{2m} \gg \frac{(\Delta p_x)^2}{2m} \gtrsim \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \equiv T_{\mathrm{min}}. \tag{4.2.45}$$

Tehát keskeny hullámcsomag és a térbeli lokalizáltságból származó „nyüzsgés" minimális kinetikue energiáját lényegesen meghaladó kinetikus energiát biztosító, nagy átlagos impulzus szükséges ahhoz, hogy a részecske mozgása a klasszikus mozgásra emlékeztessen. Ilyen feltételek mellett várhatjuk, hogy legalább kezdetben a mozgás emlékeztetni fog a klasszikus mechanikaira. Ahogy azonban telik az idő, a hullámcsomag szétfolyik. A szétfolyás karakterisztikus ideje

$$\tau = \frac{\hbar m}{(\Delta p_x)^2} \leq \frac{m(\Delta x)^2}{\hbar}. \tag{4.2.46}$$

Mivel $\hbar \approx 10^{-34}$ Js, az alábbi becsült értékeket kapjuk néhány esetben, adott m nyugalmi tömegű, Δx „kiterjedésű" részecske esetén:

Objektum	m	Δx	τ	T_{min}
Föld	$6 \cdot 10^{24}$ kg	$6 \cdot 10^{6}$ m	$2 \cdot 10^{72}$ s	$\sim 10^{-107}$ J
Golyó	1 kg	10^{-2} m	10^{30} s	$\sim 10^{-64}$ J
Elektron	10^{-30} kg	10^{-15} m	10^{-26} s	$\sim 10^{-8}$ J ~ 30 GeV

Ez az kis számolás jól illusztrálja, hogy egy klasszikus mechanikai részecske esetén a szétfolyás lényegében nem figyelhető meg és a klasszikus mechanikai kinetikus energiák nagyságrendje pedig messze meghaladja a klasszikusság teljesüléséhez szükséges kinetikus energia küszöbértékét. Ugyanakkor az is jól látszik, hogy az elektron és a hozzá hasonló mikrorészecskék világában a hullámcsomagnak a kvantumfluktuációk miatti szétfolyása nagyon jelentős és csak extrém nagy kinetikus energiák esetén teljesülnek a klasszikus mozgás feltételei.

4.2.7. Dobozba zárt részecske

Tegyük fel, hogy egy pontrészecske szabadon mozog egy doboz belsejében. Az egyszerűség kedvéért legyen a mozgás egy-dimenziós. A dobozt olyan $V(x)$ potenciállal modellezzük, amely a doboz belsejében nulla, a doboz falainál pedig végtelen értéket vesz fel:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha} \quad x \in (0, L) \\ +\infty, & \text{ha} \quad x = 0 \text{ vagy } x = L \end{cases}, \tag{4.2.47}$$

ahol L a doboz oldalának hossza. A részecske Hamilton-operátora:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^{\,2}}{2m} + V(x), \tag{4.2.48}$$

ahol m a részecske tehetetlen tömege. Mivel a potenciál a doboz falainál végtelenné válik, azért a dobozon kívül a hullámfüggvénynek azonosan el kell tűnnie. Mivel a közönséges másodrendű differenciálegyenlet megoldása kétszer differenciálható, azért a hullámfüggvény folytonos és folytonosan differenciálható. A doboz hatŕánál tehát

1. a részecske hullámfüggvényének el kell tűnnie:

$$\psi(x) = 0, \quad \text{ha} \quad x \leq 0 \quad \text{vagy } x \geq L, \tag{4.2.49}$$

2. a részecske hullámfüggvénye első deriváltjának is el kell tűnnie:

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = 0, \quad \text{ha} \quad x = 0 \quad \text{vagy } x = L. \tag{4.2.50}$$

Keressük meg a dobozba zárt részecske stacionárius állapotait. A stacionárius Schrödinger-egyenlet az $x \in [0, L]$ intervallumban

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x) \tag{4.2.51}$$

alakot ölt. Vegyük észre, hogy ennek az egyenletnek a megoldásai

$$\psi_{k_x}(x) = A(k_x)e^{ik_x x} \tag{4.2.52}$$

alakúak. Csakugyan, behelyettesítéssel meggyőződhetünk róla, hogy az ilyen alakú függvények megoldások, ha

$$E_{k_x} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m}. \tag{4.2.53}$$

A kapott függvények azonban nem elégítik ki a határfeltételeket. A határfeltételeket is kielégítő stacionárius hullámfüggvényeket úgy kapunk, hogy lineárisan szuperponáljuk a ψ_{k_x} és a „visszavert" ψ_{-k_x} hullámfüggvényeket:

$$\psi(x) = A_{k_x}\psi_{k_x}(x) + A_{-k_x}\psi_{-k_x}(x). \tag{4.2.54}$$

Ekkor a határfeltételekből:

$$A_{k_x} + A_{-k_x} = 0, \qquad A_{k_x}e^{ik_x L} + A_{-k_x}e^{-ik_x L} = 0. \tag{4.2.55}$$

Az A_{k_x} és az A_{-k_x} együtthatókra vonatkozó homogén lineáris egyenletrendszert kaptunk, amelynek akkor és csak akkor van nem triviális megoldása, ha az egyenletrendszer determinánsa zérus, azaz ha

$$\left|\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ e^{ik_x L} & e^{-ik_x L} \end{pmatrix}\right| = 0, \quad \rightarrow \quad e^{-ik_x L} - e^{ik_x L} = -2i\sin(k_x L) = 0. \tag{4.2.56}$$

A determináns csak diszkrét k_x-értékek esetén tűnik el:

$$k_x = n_x\frac{\pi}{L}, \qquad n_x = 0, 1, 2, \ldots \tag{4.2.57}$$

ahol n_x nem negatív egész számok. Az első határfeltételi egyenletből

$$A_{-k_x} = -A_{k_x}, \tag{4.2.58}$$

úgyhogy a stacionárius Schrödinger-egyenlet megoldásai

$$\psi_{n_x}(x) = 2iA(k_x)\sin(k_x x) \tag{4.2.59}$$

alakúak és rendre az

$$E_{n_x} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n_x^2 \tag{4.2.60}$$

diszkrét energia-sajátértékekhez tartoznak, ahol $n_x = 1, 2, \ldots$ pozitív egész számok. Az $n_x = 0$ esetet ki kell zárjuk, mert ekkor a hullámfüggvény azonosan zérusnak adódna, ami nem lehet fizikai állapot, mert a normája zérus.

A kapott stacionárius megoldásokat kiegészítve a megfelelő, időtől függő fázisfaktorral, megkapjuk a stacionárius állapotok időtől függő hullámfüggvényeit:

$$\Psi_{n_x}(x,t) = 2iA(k_x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n_x}t}\sin(n_x\frac{\pi}{L}x). \tag{4.2.61}$$

Ez alakját tekintve olyan állóhullám, amelynek csomópontjai vannak a doboz falainál. Mivel $k_x = \frac{2\pi}{\lambda}$, ezért a diszkrét hullámszámokat meghatározó összefüggés

$$L = n_x \frac{\lambda}{2} \tag{4.2.62}$$

alakba írható át. Innen látjuk, hogy a n_x egész szám azt mutatja meg, hogy a félhullámhossz hányszor fér rá a doboz élhosszára.Az állóhullám kialakulását megértjük, ha visszaírjuk a hullámfüggvényt a két exponenciális kifejezés szuperpozíciójába:

$$\begin{aligned}\Psi_{n_x}(x,t) &= A(k_x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n_x}t}\left[\exp\left\{in_x\frac{\pi}{L}x\right\} - \exp\left\{-in_x\frac{\pi}{L}x\right\}\right] \\ &= A(k_x)\left[\exp\{-\frac{i}{\hbar}(E_{n_x}t - k_{n_x}\hbar x)\} - \exp\{-\frac{i}{\hbar}(E_{n_x}t + k_{n_x}\hbar x)\}\right]\end{aligned} \tag{4.2.63}$$

Ez két, egymással szembe futó, egymáshoz képest π fáziskülönbséggel találkozó, azonos amplitudójú, $\omega = E_{n_x}/\hbar$ körfrekvenciájú és k_{n_x} ill. $-k_{n_x}$ hullámvektorú síkhullám szuperpozíciója. Egyébként szokás azt mondani, hogy $p_x = k_{n_x}\hbar$ a $\psi_{k_{n_x}}(x)$ hullámmal leírt részecske kváziimpulzusa, mert ez a hullámfüggvény, bár nem a határfeltételeket is kielégítő megoldása a stacionárius Schrödinger-egyenletnek, de sajátfüggvénye az impulzus operátorának,

$$\hat{p}_x\psi_{n_x} = k_{n_x}\hbar\psi_{n_x}, \tag{4.2.64}$$

mint arról behelyettesítéssel könnyen meggyőződhetünk.

A stacionárius hullámfüggvényeket normálhatjuk 1-re:

$$\begin{aligned}1 &= 4\int_0^L dx|A(k_x)|^2\sin^2(k_x x) = 4L\frac{|A(k_x)|^2}{k_x L}\int_0^{k_x L} d\xi \sin^2\xi \\ &= 2L|A(k_x)|^2,\end{aligned} \tag{4.2.65}$$

ahonnan egy lényegtelen fázisfaktor erejéig

$$A(k_x) = \frac{-i}{\sqrt{2L}} \tag{4.2.66}$$

adódik.**A stacionárius megoldások teljes rendszere tehát:**

$$\psi_{n_x}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(n_x\frac{\pi}{L}x\right), \qquad n_x = 1,2,3,\ldots \tag{4.2.67}$$

és a megfelelő energiasajátértékek pedig:

$$E_{n_x} = \frac{\hbar^2\pi^2 n_x^2}{2mL^2}, \qquad n_x = 1,2,3,\ldots \tag{4.2.68}$$

Tanulságos észrevenni, hogy **a dobozba zárt részecskének az alapállapotában is van zérustól különböző energiája:**

$$E_{alap} = E_{n_x=1} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}. \tag{4.2.69}$$

Ez a Heisenberg-féle határozatlansági reláció következménye. Az alapállapotban levő részecske helybizonytalansága $\Delta x \sim L$, ezért az impulzusbizonytalansága legalább $\Delta p_x \sim \frac{\hbar}{L}$ nagyságrendű, ami

$$E_0 \sim \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2mL^2} \tag{4.2.70}$$

nagyságrendű kinetikus energiát eredményez. Valójában a kinetikus energia legkisebb értéke a becsült E_0 értéknél is nagyobb.

A dobozba zárt részecskének az impulzusa nem jól meghatározott, mert $[\hat{H}, \hat{p}_x] \neq 0$, és az impulzus várható értéke pedig minden stacionárius állapotban zérus:

$$\int_0^L dx \psi^*_{n_x} \hat{p}_x \psi_{n_x} = \int_0^L dx \psi^*_{n_x} \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi_{n_x} = 0. \tag{4.2.71}$$

Ez azt jelenti, hogy **a dobozba zárt részecske kinetikus energiája nem haladó mozgásból, hanem nyüzsgésből származik. A hullámfüggvény szét van kenve az egész dobozban, de nem egyenletesen. Minél „hullámosabb", annál nagyobb a deriváltból származó kinetikus energia.** A részecske hullámfüggvénye állóhullámot ír le, amelynek a dobozon belül annyi csomópontja van, amennyi $n_x - 1$ értéke, azaz növekvő sorrendben, ahányadik gerjesztett állapotról van szó. **Ez a pontrészecske egy-dimenziós mozgására vonatkozó csomóponti tétel következménye, amely szerint, ha a részecske gerjesztett (stacionárius) állapotait energia szerint növekvő sorrendben sorszámozzuk, akkor a gerjesztett állapot hullámfüggvényének pontosan annyi csomópontja van, ahányadik gerjesztett állapotról van szó. Az alapállapotnak, azaz a nulladik gerjesztett állapotnak nincsen csomópontja.** A tételt úgy kell alkalmazni, hogy a csomópontok számába csak a dobozon belüli csomópontokat kell beleszámolni, azaz a határokon elhelyezkedőket nem.

Összhangban azzal, hogy a dobozba zárt, stacionárius állapotú részecskének zérus az impulzusa, azt találjuk, hogy a sebessége is zérus. A sebesség operátorát az $\dot{\hat{x}} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{x}, \hat{H}]$ operátorral értelmeztük, ennek várható értéke az n-edik stacionárius állapotban:

$$\begin{aligned}
i\hbar\langle n|\dot{\hat{x}}|n\rangle &= \frac{1}{2m}\langle n|x\hat{p}_x^2 - \hat{p}_x^2 x|n\rangle \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^L dx \frac{2}{L}\sin(n\frac{\pi}{L}x)\left[x\frac{d^2}{dx^2} - \frac{d^2}{dx^2}x\right]\sin(n\frac{\pi}{L}x) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^L dx \frac{2}{L}\sin(n\frac{\pi}{L}x)\left[x\frac{d^2}{dx^2} - \left(2\frac{d}{dx} + x\frac{d^2}{dx^2}\right)\right]\sin(n\frac{\pi}{L}x) \\
&= \frac{2\hbar^2}{mL}n\frac{\pi}{L}\int_0^L dx \sin(n\frac{\pi}{L}x)\cos(n\frac{\pi}{L}x) = 0.
\end{aligned} \tag{4.2.72}$$

Vizsgáljuk még meg, hogy hogyan teljesül a Heisenberg-féle határozatlansági reláció. Ehhez rendre meghatározzuk a részecske helykoordinátájának és impulzusának a szórását, A megfelelő szórásnégyzetek, definíció szerint:

$$(\Delta x)^2 = \langle n|\hat{x}^2|n\rangle - (\langle n|\hat{x}|n\rangle)^2 = \langle n|\hat{x}^2|n\rangle - \frac{L^2}{4},$$
$$(\Delta p_x)^2 = \langle n|\hat{p}_x^2|n\rangle - (\langle n|\hat{p}_x|n\rangle)^2 = \langle n|\hat{p}_x^2|n\rangle, \tag{4.2.73}$$

ahol felhasználtuk, hogy a p_x impulzus várható értéke zérus bármelyik stacionárius állapotban és az x koordináta várható értéke:

$$\begin{aligned}\langle n|\hat{x}|n\rangle &= \frac{2}{L}\int_0^L dx\; x\sin^2(n\frac{\pi}{L}x)\\ &= \frac{1}{L}\int_0^L dx\; x\left[1-\cos(n\frac{2\pi}{L}x)\right] = \frac{L}{2} - \frac{1}{2n\pi}\left[x\sin(n\frac{2\pi}{L}x)|_0^L - \int_0^L dx\sin(n\frac{2\pi}{L}x)\right]\\ &= \frac{L}{2} + \frac{L}{4n^2\pi^2}\cos(n\frac{2\pi}{L}x)|_0^L\\ &= \frac{L}{2}.\end{aligned} \tag{4.2.74}$$

Az impulzus négyzetének várható értéke:

$$\langle n|\hat{p}_x^2|n\rangle = 2mE_n = \frac{\hbar^2\pi^2n^2}{L^2}. \tag{4.2.75}$$

A helykoordináta négyzetének a várható értéke:

$$\begin{aligned}\langle n|\hat{x}^2|n\rangle &= \frac{2}{L}\int_0^L dx\; x^2\sin^2(n\frac{\pi}{L}x)\\ &= \frac{1}{L}\int_0^L dx\; x^2\left[1-\cos(n\frac{2\pi}{L}x)\right]\\ &= \frac{L^2}{3} - \frac{1}{2n\pi}\left[x^2\sin(n\frac{2\pi}{L}x)|_0^L - \int_0^L dx 2x\sin(n\frac{2\pi}{L}x)\right]\\ &= \frac{L^2}{3} - \frac{L}{4n^2\pi^2}\left[2x\cos(n\frac{2\pi}{L}x)|_0^L - 2\int_0^L dx\cos(n\frac{2\pi}{L}x)\right]\\ &= \frac{L^2}{3} - \frac{L^2}{2n^2\pi^2}.\end{aligned} \tag{4.2.76}$$

Ezért

$$(\Delta x)^2 = \frac{1}{12}L^2\left(1-\frac{6}{n^2\pi^2}\right) \tag{4.2.77}$$

szigorúan monoton növekszik, ahogy egyre magasabban gerjesztett állpotokat nézünk és aszimptotikusan tart a $(\Delta x)^2 = \frac{1}{12}L^2$ értékhez, ha $n\to\infty$, míg az impulzus szórásnégyzete n^2-tel arányosan, minden határon túl nő az $n\to\infty$ limeszben. Ugyanakkor a hely és az impulzusbizonytalanság szorzata a

$$\Delta x\Delta p_x = \frac{\hbar\pi}{\sqrt{12}}n\sqrt{1-\frac{6}{n^2\pi^2}} \geq \frac{\hbar\pi}{\sqrt{12}}\sqrt{1-\frac{6}{\pi^2}} \tag{4.2.78}$$

egyenlőtlenségnek tesz eleget. Látjuk, hogy az alapállapotban a legkisebb a hely és az impulzus bizonytalanságának szorzata és teljesül a határozatlansági reláció.

A kapott megoldást könnyű 3-dimenziós dobozba zárt részecskére általánosítani. A részecske Hamilton-operátorában a Descartes-féle koordinátarendszer független

irányaiban történő mozgások koordinátái (pontosabban a megfelelő impulzuskomponensek operátorai) különböző tagokban, szeparáltan fordulnak elő,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}, \tag{4.2.79}$$

úgyhogy a részecske hullámfüggvénye az x-, az y- és a z-irányú, független mozgásokat leíró hullámfüggvények szorzata:

$$\begin{aligned} \psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) &= \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(n_x \frac{\pi}{L_x} x\right) \sin\left(n_y \frac{\pi}{L_y} y\right) \sin\left(n_z \frac{\pi}{L_z} z\right), \\ E_{n_x,n_y,n_z} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\right), \end{aligned} \tag{4.2.80}$$

ahol n_x, n_y és n_z pozitív egész számok.

4.2.8. Részecske visszaverődése végtelen potenciálfalon

Végül érdemes megmutatni az időüggő Schrödinger-egyenlet megoldása alapján, hogy **végtelen potenciálfalba ütköző részecske a falon rugalmasan visszaverődik.** Ebből a célból vizsgáljuk a következő, egy-imenziós esetet. Legyen a potenciál

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha} \quad x < 0 \\ +\infty, & \text{ha} \quad x > 0 \end{cases}. \tag{4.2.81}$$

Állítsunk össze egy

$$\psi_{\text{be}}(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dp_x e^{-\frac{(p_x - p_0)^2}{2\sigma^2}} e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - \frac{p_x^2}{2m} t)} \tag{4.2.82}$$

alakú hullámcsomagot, ami a szabad részecske időtől függH́ o Schrödinger-egyenletének megoldása. Ez egy olyan hullámcsomag, amelynek maximuma az $x_0 = \frac{p_0}{m} t \to -\infty$ helyen van, ha $t \to -\infty$ és amelyik jobbra halad, azaz a potenciálalhoz közeledik. Válasszuk a hullámcsomag impulzustérbeli relatív szélességét kicsinek, azaz legyen $\sigma \ll p_0$. A hullámcsomag térbeli kiterjedése

$$\frac{\hbar}{\sigma}\left(1 + \frac{\sigma^4 t^2}{\hbar^2 m^2}\right). \tag{4.2.83}$$

álasszuk a részecske elindításának időpontját, a kezdeti $t = t_0 < 0$ időpontot úgy, hogy a hullámcsomag ,,ne érje el" a falat, azaz

$$\frac{\hbar}{\sigma}\left(1 + \frac{\sigma^4 t_0^2}{\hbar^2 m^2}\right) \ll -\frac{p_0}{m} t_0 \tag{4.2.84}$$

legyen. Innen

$$\frac{\hbar^2}{\sigma^2} \ll t_0^2 \left(\frac{p_0^2}{m^2} - \frac{\sigma^2}{m^2}\right) \approx \frac{p_0^2}{m^2} t_0^2, \tag{4.2.85}$$

azaz

$$t_0^2 \gg \frac{\hbar^2 m^2}{p_0^2 \sigma^2}, \tag{4.2.86}$$

és ez a feltétel kellH́ oen korai T_0 időpontot választva kielégíthető.

A potenciálfalba ütköző részecske hullámfüggvénye az

$$i\hbar\partial_t\Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\Psi(x,t) \tag{4.2.87}$$

Schrödinger-egyenlet olyan megoldása, amely eleget tesz annak a kezdeti feltételnek, hogy $t \to t_0 \to -\infty$ esetén

$$\Psi(x,t) \sim \psi_{\mathrm{be}}(x,t). \tag{4.2.88}$$

Mivel az $x > 0$ térfélen a potenciál végtelen, ott $\Psi(x,t) \equiv 0$. Az $x < 0$ térfélen a megoldást a bejövő hullámcsomag és egy visszavert hullámcsomag alakjában érdemes keresni:

$$\Psi(x,t) = A(t)\psi_{\mathrm{be}}(x,t) + B(t)\psi_{\mathrm{v}v}(x,t), \tag{4.2.89}$$

ahol feltesszük, hogy a visszavert hullámcsomag csak annyiban különbözik a befutótól, hogy benne minden síkhullámkomponens az ellenkező irányba halad:

$$\psi_{\mathrm{v}v}(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dp_x e^{-\frac{(-p_x-p_0)^2}{2\sigma^2}} e^{\frac{i}{\hbar}(-p_x x - \frac{p_x^2}{2m}t)}. \tag{4.2.90}$$

Az $A(t)$ és $B(t)$ együtthatók időfüggése határozza meg, hogy a visszaverődés folyamatában éppen hol járunk. Ha $t \to -\infty$, akkot $A(t) \to A_0$ és $B(t) \to 0$ jelzi, hogy még nem kezdődött el a visszaverődés. Ha $t \approx 0$, akkor nyilván részlegesen megtörtént a visszaverődés és a befutó és a visszavert hullámcsomag szuperpozícióját kell lássuk, tehát sem $A(0)$ sem $B(0)$ nem zérus. Végül azt várjuk, hogy $t \to \infty$ esetén a megoldás csak a visszavert hullámcsomagot, azaz a faltól távolodó részecskét leíró hullámcsomagot tartalmazza csak, azaz $B(t) \to B_0$ és $A(t) \to 0$. Ha valóban van ilyen alakú megoldás, akkor a hullámfüggvény normájának állandósága miatt a $|B_0|^2 = |A_0|^2$ egyenlőségnek kell teljesülnie. A feladat így a szabad Schrödinger-egyenlet,

$$i\hbar\partial_t\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi(x,t) \tag{4.2.91}$$

megoldása az $x < 0$ félegyenesen, a $\Psi(0,t) \equiv 0$ határfeltétellel. A (4.2.89) alakú hullámfüggvény mindkét tagja külön-külön megoldása a szabad Schrödinger-egyenletnek az $x < 0$ félegyenesen. A határfeltétel pedig azt jelenti, hogy

$$B(t) = -A(t)\frac{\psi_{\mathrm{be}}(0,t)}{\psi_{\mathrm{v}v}(0,t)} = -A(t), \tag{4.2.92}$$

mert $p_x \to -p_x$ változótranszformációval beláthatjuk, hogy $\psi_{\mathrm{be}}(0,t) = \psi_{\mathrm{v}v}(0,t)$. Ez azt jelenti, hogy a megoldás valóban a bejövő és a visszavert hullámcsomag lineáris szuperpozíciója, és hogy a

$$\Psi(x,t) \sim A_0\psi_{\mathrm{be}}(x,t), \quad t \to -\infty \tag{4.2.93}$$

kezdeti feltételhez a

$$\Psi(x,t) \sim -A_0\psi_{\mathrm{v}v}(x,t), \quad t \to \infty \tag{4.2.94}$$

aszimptotikus viselkedésű megoldás tartozik. Az ilyen tulajdonságú $\Psi(x,t)$ hullámfüggvény azt írja le, hogy a részecske rugalmasan ütközik a potenciálfallal. Ezt azért állíthatjuk, mert a visszavert

részecske impulzusa az aszimptotikus tartományban,

$$\begin{aligned}
\langle \hat{p}_x \rangle_{\mathrm{vv}} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{\mathrm{vv}}^{\star}(x,t) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi_{\mathrm{vv}}(x,t) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dq_x \int_{-\infty}^{\infty} dp_x e^{-\frac{(-q_x-p_0)^2}{2\sigma^2}} e^{-\frac{i}{\hbar}(-q_x x - \frac{q_x^2}{2m}t)} \\
&\quad \times (-p_x) e^{-\frac{(-p_x-p_0)^2}{2\sigma^2}} e^{\frac{i}{\hbar}(-p_x x - \frac{p_x^2}{2m}t)} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dq_x \int_{-\infty}^{\infty} dp_x e^{-\frac{(-q_x-p_0)^2}{2\sigma^2}} e^{\frac{i}{\hbar}(q_x x + \frac{q_x^2}{2m}t)} \\
&\quad \times (-p_x) e^{-\frac{(-p_x-p_0)^2}{2\sigma^2}} e^{\frac{i}{\hbar}(-p_x x - \frac{p_x^2}{2m}t)} \\
&= -\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dq_x \int_{-\infty}^{\infty} dp_x e^{-\frac{(q_x-p_0)^2}{2\sigma^2}} e^{\frac{i}{\hbar}(-q_x x + \frac{q_x^2}{2m}t)} \\
&\quad \times p_x e^{-\frac{(p_x-p_0)^2}{2\sigma^2}} e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - \frac{p_x^2}{2m}t)} \\
&= -\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{\mathrm{be}}^{\star}(x,t) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi_{\mathrm{be}}(x,t) \\
&= -\langle \hat{p}_x \rangle_{\mathrm{be}}. \qquad (4.2.95)
\end{aligned}$$

A kapott összefüggés valóban azt mutatja, hogy az impulzus nagysága nem változott, de az iránya ellentétesre fordult a visszaverődés után.

4.2.9. Lineáris harmonikus oszcillátor

A lineáris harmonikus oszcillátort egy olyan, egy-dimenziós mozgást végző pontrészecske valósítja meg, amelyik a

$$V(x) = \frac{1}{2} D x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \qquad (4.2.96)$$

potenciálban mozog, ahol $D = m\omega^2$ a visszatérítő erő (idegen szóval direkciós erő), m a részecske tehetetlen tömege és ω a megfelelő klasszikus mozgás során a körfrekvencia. Utóbbinak a kvantummechanikai jelentését majd később fogjuk látni. A lineáris harmonikus oszcillátor Hamilton-operátora tehát:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2} D \hat{x}^2, \qquad (4.2.97)$$

amely koordináta-reprezentációban

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} D x^2 \qquad (4.2.98)$$

alakot ölt. Az egyszerűség kedvéért az x helykoordinátáról érdemes áttérni a

$$\xi = \sqrt{m\omega^2} x \qquad (4.2.99)$$

változóra, amelynek segítségével

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \hbar^2 \omega^2 \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2} \xi^2, \qquad (4.2.100)$$

és a stacionárius

$$\hat{H}\psi(\xi) = E\psi(\xi) \tag{4.2.101}$$

Schrödinger-egyenlet pedig

$$-\hbar^2\omega^2\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + \xi^2\psi(\xi) = 2E\psi(\xi) \tag{4.2.102}$$

alakot ölt. Ennek az egyenletnek a négyzetesen integrálható megoldásait keressük, amelyekre[45]

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx|\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{m\omega^2}}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi|\psi(\xi)|^2 = 1. \tag{4.2.103}$$

Az integrál (egyenletes) konvergenciáját az biztosítja, ha létezik olyan $K > 0$ állandó, hogy $|\psi(x)| < K|x|^{-\frac{1}{2}}$, ha $|x| \to \infty$. Ezt másképpen úgy is nézhetjük, hogy megtaláltuk azt a határfeltételt, aminek a keresett megoldásoknak eleget kell tenniük a térbeli tartomány (x-tengely) végtelenben található $|x| \to \infty$ határain.

A lineáris harmonikus oszcillátor stacionárius állapotainak hullámfüggvényeit és a megfelelő energiasajátértékeket az alábbi lépésekben találjuk meg:

1. Megsejtjük a stacionárius Schrödinger-egyenlet egy speciális megoldását, amelyről később belátjuk, hogy az alapállapotot írja le.

2. Léptető operátorokat értelmezünk, amelyek segítségével a Hamilton-operátor egy tetszőleges sajátállapotából megkapjuk az összes többi állapototħω energia-adagonként csökkentve, ill. növelve a gerjesztési energiát.

3. Végül belátjuk, hogy létezik a lineáris oszcillátor legkisebb energiájú állapota, és hogy ez azonos az első lépésben megsejtett megoldással.

Ha ezeket a lépéseket végrehajtjuk, akkor megtaláljuk a lineáris harmonikus oszcillátor összes stacionárius állapotát, amelyek hullámfüggvényei (1-re történt normálás után) ortonormált teljes rendszert alkotnak a lineáris harmonikus oszcillátor állapotainak Hilbert-terében. **Azt szoktuk mondani, hogy ezzel az eljárással megkonstruáltuk a lineáris harmonikus oszcillátor állapotainak Hilbert-terét,** hiszen a stacionárius állapotok (lineŕis kombinációik révén) felfeszítik a teljes Hilbert-teret[46].

Menjünk most végig lépésről lépésre a fenti programon.

[45]Nem vezetünk be külön jelölést a hullámfüggvényre, amikor nem az x, hanem a ξ változó függvényének tekintjük.

[46]Az itt követett eljárás a gerjesztett állapotokat az alapállapotból állítja elő, miközben felhasználja a léptető operátorok algebrai tulajdonságait. Ezért ezt az eljárás **a Hilbert-tér algebrai megkonstruálásának** is nevezik. Van egy másik lehetőség is a gerjeszett állapotok megkeresésére, amikor közvetlenül megoldjuk a stacionárius Schrödinger-egyenletet az analízis módszereivel.

1. Első megállapításunk az, hogy a lineáris harmonikus oszcillátor stacionárius Schrödinger-egyenletének van - többek között –

$$\psi_0(\xi) = C_0 e^{-\alpha\xi^2} \tag{4.2.104}$$

alakú megoldása. Csakugyan, ha a feltételezett alakot behelyettesítjük a Schrödinger-egyenletbe, azt kapjuk, hogy

$$-\hbar^2\omega^2(-2\alpha + 4\alpha^2\xi^2) + \xi^2 = 2E, \tag{4.2.105}$$

ahonnan

$$(4\alpha^2\hbar^2\omega^2 - 1)\xi^2 = -(2E - 2\alpha\hbar^2\omega^2), \tag{4.2.106}$$

ami akkor és csak akkor teljesülhet a ξ változó tetszőleges értéke esetén, ha az egyenlet bal oldala sem függ ξ-től, azaz ha

$$2\alpha = \pm\frac{1}{\hbar\omega}. \tag{4.2.107}$$

Ekkor azonban

$$E = \frac{1}{2}\cdot 2\alpha\hbar^2\omega^2 = \pm\frac{1}{2}\hbar\omega. \tag{4.2.108}$$

Másrészt a hullámfüggvénynek normálhatónak kell lennie, ami kizárja α negatív értékeit. Így egyetlen megoldást találunk, ami a feltételezett alakú:

$$\psi_0(\xi) = C_0 \exp\left\{-\frac{\xi^2}{2\hbar\omega}\right\} = C_0 \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\}, \tag{4.2.109}$$

és ez az

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{4.2.110}$$

energiasajátértékhez tartozó sajátállapot hullámfüggvénye. A C_0 együttható értékét (egy egységnyi abszolútértékű komplex fázisfaktor erejéig) a

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx|\psi_0(\xi)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx|C_0|^2 \exp\left\{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right\} = |C_0|^2\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} \tag{4.2.111}$$

normálási feltételből határozhatjuk meg:

$$C_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}. \tag{4.2.112}$$

A helyesen normált hullámfüggvény tehát

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\}. \tag{4.2.113}$$

2. A többi energiasajátértéket és a megfelelő energiasajátállapotok hullámfüggvényeit a ψ_0 megoldásból kapjuk meg. Vezessük be az alábbi operátorokat:

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\xi - \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\frac{d}{d\xi}, \qquad \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\xi + \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\frac{d}{d\xi}. \tag{4.2.114}$$

Ezek az operátorok a végtelenben kirótt határfeltételnek eleget tevő függvények tere fölött nem önadjungáltak, hanem egymásnak adjungáltjai:

$$(\hat{a}^+)^\dagger = \hat{a}, \quad \hat{a}^\dagger = \hat{a}^+. \tag{4.2.115}$$

Legyen $\psi(\xi)$ és $\phi(\xi)$ két, a határfeltételeknek eleget tevő, tetszőleges függvény, akkor

$$\begin{aligned}
\langle\phi|(\hat{a}^+)^\dagger|\psi\rangle &= \langle\psi|\hat{a}^+|\phi\rangle^\star = \frac{1}{\sqrt{m\omega^2}}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\psi(\xi)\left(\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\xi - \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\frac{d}{d\xi}\right)\phi^\star(\xi) \\
&= \frac{1}{\sqrt{m\omega^2}}\left(\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\psi(\xi)\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\xi\phi^\star(\xi) - \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\Big[\psi(\xi)\phi^\star(\xi)\Big]_{-\infty}^{\infty}\right. \\
&\quad \left. + \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\phi^\star(\xi)\frac{d}{d\xi}\psi(\xi)\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{m\omega^2}}\left(\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\phi^\star(\xi)\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\xi\psi(\xi) + \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\phi^\star(\xi)\frac{d}{d\xi}\psi(\xi)\right) \\
&= \langle\phi|\hat{a}|\psi\rangle.
\end{aligned} \tag{4.2.116}$$

Ezt akartuk bizonyítani. Az utolsó egyenlőség felírásakor felhasználtuk a határfeltételt.

Képezzük a $\hat{n} \equiv \hat{a}^+\hat{a}$ operátort:

$$\hat{n} = \hat{a}^+\hat{a} = \frac{1}{2\hbar\omega}\xi^2 - \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} - \frac{\hbar\omega}{2}\frac{d^2}{d\xi^2} = \left(\hat{H} - \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\frac{1}{\hbar\omega}. \tag{4.2.117}$$

Mivel az $\hat{n}$ operátor az önadjungált H Hamilton-operátorból valós számmal történt szorzással és az egység-operátor valós számszorosának kivonásával áll elő (önadjungált operátorok valós együtthatókkal képezett lineáris kombinációja), ezért az $\hat{n}$ operátor önadjungált.

Az $\hat{n}$ operátor önadjungáltságáról közvetlenül is meggyőződhetünk, ha belátjuk, hogy tetszőleges, a határfeltételeknek eleget tevő $\psi(x)$ és $\phi(x)$ függvények esetén

$$\langle\phi|\hat{n}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{n}|\phi\rangle^\star. \tag{4.2.118}$$

Alakítsuk át azonosan a jobboldalt,

$$
\begin{aligned}
\langle\psi|\hat{n}|\phi\rangle^\star &= \frac{1}{\sqrt{m\omega^2}}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\psi(\xi)\left(\frac{1}{2\hbar\omega}\xi^2-\frac{1}{2}-\frac{\hbar\omega}{2}\frac{d^2}{d\xi^2}\right)\phi^\star(\xi)\\
&= \frac{1}{\sqrt{m\omega^2}}\left(\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\psi(\xi)\frac{1}{2\hbar\omega}\xi^2\phi^\star(\xi)-\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\psi(\xi)\phi^\star(\xi)-\frac{\hbar\omega}{2}\left[\psi(\xi)\frac{d}{d\xi}\phi^\star(\xi)\right]_{-\infty}^{\infty}\right.\\
&\quad\left.+\frac{\hbar\omega}{2}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\frac{d\psi(\xi)}{d\xi}\,\frac{d\phi^\star(\xi)}{d\xi}\right)\\
&= \frac{1}{\sqrt{m\omega^2}}\left(\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\psi(\xi)\frac{1}{2\hbar\omega}\xi^2\phi^\star(\xi)-\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\psi(\xi)\phi^\star(\xi)+\frac{\hbar\omega}{2}\left[\phi^\star(\xi)\frac{d\psi(\xi)}{d\xi}\right]_{-\infty}^{\infty}\right.\\
&\quad\left.-\frac{\hbar\omega}{2}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\phi^\star(\xi)\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2}\right)\\
&= \frac{1}{\sqrt{m\omega^2}}\left(\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\psi(\xi)\frac{1}{2\hbar\omega}\xi^2\phi^\star(\xi)-\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\psi(\xi)\phi^\star(\xi)\right.\\
&\quad\left.-\frac{\hbar\omega}{2}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\phi^\star(\xi)\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2}\right)\\
&= \langle\phi|\hat{n}|\psi\rangle. \qquad (4.2.119)
\end{aligned}
$$

Az $\hat{n}$ operátor tehát önadjungált, úgyhogy a sajátértékei valósak. Az $\hat{n}$ operátor segítségével a Hamilton-operátor

$$\hat{H}=\hbar\omega\hat{n}+\frac{1}{2}\hbar\omega=\hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a}+\frac{1}{2}\right) \qquad (4.2.120)$$

alakot ölt. Kérdés, mit nyertünk a Hamilton-operátor azonos átalakításával. Ha megkeressük az $\hat{a}$, $\hat{a}^+$ és $\hat{n}$ operátorok kommutátorait, akkor látni fogjuk, hogy könnyűszerrel le tudjuk majd olvasni a Hamilton-operátor sajátértékeit, sőt a megfelelő sajátállapotokat is elő tudjuk majd állítani a $\psi_0(\xi)$ állapotból. A kérdéses kommutátorok:

(a) Képezzük az $\hat{a}\hat{a}^+$ operátor-szorzatot:

$$\hat{a}\hat{a}^+=\frac{1}{2\hbar\omega}\xi^2+\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}-\frac{\hbar\omega}{2}\frac{d^2}{d\xi^2}. \qquad (4.2.121)$$

Ezt és $\hat{a}^+\hat{a}$-ra vonatkozó korábbi eredményünket felhasználva,

$$[\hat{a},\hat{a}^+]=\hat{1} \qquad (4.2.122)$$

adódik.

(b) Az előző pontban meghatározott kommutátor segítségével kapjuk, hogy

$$[\hat{a}^+\hat{a},\hat{a}]=-\hat{a},\qquad [\hat{a}^+\hat{a},\hat{a}^+]=\hat{a}^+. \qquad (4.2.123)$$

Valóban, rendre

$$
\begin{aligned}
&[\hat{a}^+\hat{a},\hat{a}]=\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}-\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}=\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}-(1+\hat{a}^+\hat{a})\hat{a}=-\hat{a},\\
&[\hat{a}^+\hat{a},\hat{a}^+]=\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+-\hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a}=\hat{a}^+(1+\hat{a}^+\hat{a})-\hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a}=\hat{a}^+. \qquad (4.2.124)
\end{aligned}
$$

Ezután vegyünk egy tetszőleges ψ_ν állapotot, amely az $\hat{n}$ operátornak valamelyik, egyelőre ismeretlen ν sajátértékéhez tartozó sajátállapota:

$$\hat{n}\psi_\nu = \nu\psi_\nu. \tag{4.2.125}$$

A ν sajátérték való, mert $\hat{n}$ önadjungált. A fenti csererelációk alapján könnyű észrevenni, hogy

$$\hat{n}(\hat{a}\psi_\nu) = (\nu - 1)(\hat{a}\psi_\nu), \qquad \hat{n}(\hat{a}^+\psi_\nu) = (\nu + 1)(\hat{a}^+\psi_\nu). \tag{4.2.126}$$

A $\hat{a}$ és a $\hat{a}^+$ operátorok tehát **léptető operátorok,** az $\hat{n}$ operátor sajátfüggvényeire hatva, annak olyan újabb sajátfüggvényét állítják elő, amely rendre 1-gyel kisebb ill. 1-gyel nagyobb sajátértékhez tartozik.

3. Kivétel az az eset, amikor az $\hat{a}$ lefelé léptető operátor a ψ_0 állapotra hat, ekkor ugyanis nullát kapunk eredményül:

$$\hat{a}\psi_0(\xi) = \left[\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\xi + \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\frac{d}{d\xi}\right]C_0 e^{-\alpha\xi^2} = 0. \tag{4.2.127}$$

Vegyük továbbá észre, hogy a léptető operátorok definiciójában

$$\pm\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\frac{d}{d\xi} \sim \pm\frac{d}{dx} \sim \pm i\hat{p}_x, \tag{4.2.128}$$

úgyhogy - $\hat{x}$ és $\hat{p}_x$ önadjungáltak lévén - ismét megkaphatjuk, hogy a léptető operátorok egymásnak adjungáltjai:

$$\hat{a}^+ = (\hat{a})^\dagger. \tag{4.2.129}$$

Mivel bármely $\hat{a}\psi_\nu$ állapot normanégyzete nem negatív,

$$0 \leq \|\hat{a}\psi_\nu\|^2 = \langle\psi_\nu|\hat{a}^+\hat{a}|\psi_\nu\rangle = \nu\langle\psi_\nu|\psi_\nu\rangle = \nu, \tag{4.2.130}$$

azért az $\hat{n}$ operátor valamennyi sajátértéke nem negatív. Mivel a nulla a sajátértékek között van, ezért **az $\hat{n}$ operátor sajátállapotainak és a hozzájuk tartozó sajátértékeknek a teljes rendszere:**

$$\begin{aligned}
&\psi_0, \qquad \nu_0 = 0,\\
&\psi_1 = C_1\hat{a}^+\psi_0, \qquad \nu_1 = 1\\
&\vdots\\
&\psi_n = C_n(\hat{a}^+)^n\psi_0, \qquad \nu_n = n,\\
&\vdots
\end{aligned} \tag{4.2.131}$$

ahol $n = 0, 1, 2, \ldots$ nem negatív egész számok. A kapott sajátállapotok egyúttal a $\hat{H}$ Hamilton-operátornak is sajátállapotai rendre az

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{4.2.132}$$

sajátértékekkel.

Érdemes felfigyelni rá:

1. A lineáris harmonikus oszcillátor energiája az alapállapotban nem nulla, hanem $\frac{1}{2}\hbar\omega$. Azt szoktuk mondani, hogy **az alapállapotú oszcillátor sincs tökéletes nyugalomban, hanem zérusponti rezgéseket végez, amelyek energiája $\frac{1}{2}\hbar\omega$.**

2. **A lineáris harmonikus oszcillátor gerjesztett állapotai diszkrétek, az energiatengelyen egyenlő, $\hbar\omega$ távolságra vannak egymástól. Az oszcillátor csak a $\hbar\omega$ elemi energiaadag egész számú többszörösét veheti fel, vagy adhatja le. Ezért az $\hat{n}$ operátort, amelynek sajátértéke azt méri, hogy az oszcillátor hány elemi energiaadaggal van gerjesztve, szokás ,,a kvantumok száma" operátorának nevezni. A kvantumok számán itt a gerjesztett oszcillátor által hordozott elemi $\hbar\omega$ energiaadagok számát kell érteni. Ugyanakkor az $\hat{a}$, ill. az $\hat{a}^+$ operátorokat joggal szokás rendre abszorpciós, ill. emissziós operátoroknak nevezni, mert ezek hatására az oszcillátor hullámfüggvénye úgy változik meg, mintha az oszcillátor rendre egy $\hbar\omega$ energiaadagot ,,adna le", ill. ,,venne fel".**

3. A csomóponti tétel most is érvényesül, **az oszcillátor által hordozott energiadagok száma egyúttal az oszcillátor megfelelő gerjesztett állapotát leíró stacionárius hullámfüggvény csomópontjainak a számával is megegyezik.**

Megint meggyőződhetünk róla, hogy **a részecske az oszcillátor-potenciálban nem végez haladó mozgást, ha stacionárius állapotban van.** Ez abból látszik, hogy a helykoordinátájának várható értéke zérus, és a p_x impulzusának, ill. az $\dot{\hat{x}} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{x}, \hat{H}]$ sebességének várható értéke is zérus:

$$\begin{aligned}
&\langle n|\hat{x}|n\rangle \approx \langle n|\hat{\xi}|n\rangle \approx \langle n|\hat{a} + \hat{a}^+|n\rangle \approx \langle n|n-1\rangle \oplus \langle n|n+1\rangle = 0,\\
&\langle n|\hat{p}_x|n\rangle \approx \langle n|\hat{a} - \hat{a}^+|n\rangle = 0,\\
&\langle n|\dot{\hat{x}}|n\rangle \approx \langle n|[\hat{x}, \hat{H}]|n\rangle \approx E_n\langle n|\hat{x} - \hat{x}|n\rangle = 0.
\end{aligned} \tag{4.2.133}$$

Végül **ellenőrizzük az alapállapot példáján, hogy teljesül a határozatlansági**

reláció. Mivel a helykoordináta és az impulzus várható értéke zérus, a szórásnégyzetek:

$$
\begin{aligned}
(\Delta x)^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx C_0^2 e^{-2\alpha\xi^2} x^2 \\
&= \frac{C_0^2}{(m\omega^2)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-2\alpha\xi^2} \xi^2 = -\frac{C_0^2}{2(m\omega^2)^{3/2}} \frac{d}{d\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \\
&= \frac{C_0^2 \sqrt{\pi}}{2(2m\omega^2\alpha)^{3/2}}, \\
(\Delta p_x)^2 &= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx C_0^2 e^{-\alpha\xi^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\alpha\xi^2} \\
&= -C_0^2 \hbar^2 \sqrt{m\omega^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\alpha\xi^2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} e^{-\alpha\xi^2} \\
&= 2\alpha C_0^2 \hbar^2 \sqrt{m\omega^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-2\alpha\xi^2} (1 - 2\alpha\xi^2) \\
&= 2\alpha C_0^2 \hbar^2 \sqrt{m\omega^2} \left(1 + \alpha \frac{d}{d\alpha}\right) \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} = C_0^2 \hbar^2 \sqrt{\frac{1}{2} m\omega^2 \pi\alpha}. \qquad (4.2.134)
\end{aligned}
$$

Ebből következik, hogy

$$
(\Delta p_x)^2 (\Delta x)^2 = \frac{\hbar^2 C_0^4 \pi}{8\alpha m\omega^2} = \frac{\hbar^2}{4}, \qquad (4.2.135)
$$

azaz

$$
\Delta p_x \Delta x = \frac{1}{2}\hbar. \qquad (4.2.136)
$$

4.2.10. Alagúteffektus

A kvantummechanika helyességét szintén igazolja, ellentmondásmentes magyarázatot ad az alagúteffektusra, amely a klasszikus fizika törvényei szerint lehetetlen lenne. Az alagúteffektus segítségével sikerült megérteni a radioaktív atommagok alfa-bomlását, és az elektronok hidegemisszióját (az elektronok kilépését fémekből erős külső elektrosztatikus tér hatására).

Klasszikus pontrészecske mozgása potenciálgát jelenlétében. Vizsgáljuk meg, **mi történik, ha részecske mozgásának útjában potenciálgát helyezkedik el.** Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy a potenciál, $V(x) > 0$, egyetlen maximummal rendelkező folytonos függvény, amely $x \to \pm\infty$ aszimptotikusan távoli potokban zérushoz tart. Legyen V_0 a potenciál értéke a maximumban, úgyhogy $0 \leq V(x) \leq V_0$. Miért beszélünk ekkor potenciálgátról? Az elnevezés a klasszikus mechanikából származik. Ha egy klasszikus pontrészecske E energiával mozog a

fenti potenciálban, akkor érvényes rá az energiamegmaradás törvénye:

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + V(x), \tag{4.2.137}$$

ahonnan a részecske impulzusa, mint a hely függvénye

$$p_x = \pm\sqrt{2m[E - V(x)]} \tag{4.2.138}$$

alakban adódik. A pozitív ill. a negatív előjel rendre a jobbra ill. a balra haladó részecskének felel meg. Ha $E > V_0$, akkor a fenti összefüggés minden x helyen értelmes, azaz valós impulzust eredményez, ami azt jelenti, hogy a részecske akadálytalanul mozoghat balról jobbra, vagy jobbról balra. Ha az energia $E < V_0$, akkor a részecske beleütközik a potenciálgátba és visszaverődik róla, akármelyik oldalról is indult. Induljon pl. balról, $x \to -\infty$ tartományból a részecske, amelynek kezdetben teljes energiája kinetikus energia,

$$p_x(x \to -\infty) = \sqrt{2mE}. \tag{4.2.139}$$

A részecske mozgása során kinetikus energiáját fokozatosan elveszti, mert az átalakul potenciális energiává. Végül eljut az x_- pontba, ahol teljes kinetikus energiája potenciális energiává alakult,

$$E = V(x_-). \tag{4.2.140}$$

Ebben a pontban a részecskére $F_x = -\frac{dV}{dx}|_{x=x_-} < 0$ erő hat, hiszen itt a potenciál növekvő x-szel növekszik. Ezért a részecske impulzusa negatívvá válik és abszolút értékben újra elkezd növekedni, ami azt jelenti, hogy a részecske visszafordult. Hasonló visszafordulás történik az x_+ pontban, amelyre $E = V(x_+)$, ha a részecske az $x \to +\infty$ tartományból indul. **Ha tehát a részecske energiája kisebb mint a potenciálgát „magassága" (azaz a potenciális energia maximális értéke), akkor a részecske, a klasszikus mechanika értelmében, nem jut át a potenciálgáton, hanem visszafordulásra kényszerül.**

Mikroszkopikus pontrészecske áthaladása potenciálgáton. **A mikroszkopikus részecskék nem a klasszikus mechanika törvényei szerint viselkednek, ha útjukba potenciálgát kerül:**

1. **Ha a részecske energiája nagyobb, mint a potenciális energia maximális értéke, $E > V_0$, a részecske bizonyos valószínűséggel ekkor is visszaverődik a potenciálgátról,** tehát nem halad át rajta 1 valószínűséggel.

2. **Ha a részecske energiája kisebb, mint a potenciális energia maximális értéke, a részecske bizonyos valószínűséggel ekkor is áthalad a potenciálgáton és megjelenik annak a túloldalán. Ezt a jelenséget nevezik alagútjelenségnek.**

A jelenséget egy olyan leegyszerűsített modellen mutatjuk be, amikor a potenciálgát

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha} \quad x < 0 \\ V_0 > 0, & \text{ha} \quad 0 \leq x \leq b \\ 0, & \text{ha} \quad x > b \end{cases} \tag{4.2.141}$$

és a részecske balról esik be a potenciálgátra. Legyen a részecske kinetikus energiája $x \to -\infty$ esetén $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Keressük a

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) \tag{4.2.142}$$

Schrödinger-egyenlet

$$\psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \phi(x) \tag{4.2.143}$$

alakú stacionárius megoldását, amelyre

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \phi(x) = E\phi(x) \tag{4.2.144}$$

alakú stacionárius Schrödinger-egyenlet áll fenn. A megoldás alakja

$$\phi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & \text{ha} \quad x < 0 \\ Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}, & \text{ha} \quad 0 \leq x \leq b \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}, & \text{ha} \quad b < x \end{cases}, \tag{4.2.145}$$

ahol

$$\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)} \tag{4.2.146}$$

valós, ha $0 \leq E \leq V_0$ és $\kappa = iK$ képzetes, ahol $K = \sqrt{2m(E - V_0)}$, ha $E > V_0$. A 6 darab állandót úgy kell meghatározni, hogy a hullámfüggvény, mint egy olyan közönséges másodrendű lineáris differenciálegyenlet megoldása, amelynek együtthatófüggvényei korlátosak, folytonosan differenciálható legyen. Ez azt jelenti, hogy $\phi(x)$ mindenütt, beleértve a tartományok határait is, folytonos és az első deriváltja is folytonos. A hullámfüggvényre és első deriváltjára vonatkozó folytonossági feltételek az egyes tartományok határait jelentő $x = 0$ és $x = b$ pontokban:

$$\begin{aligned} &A + B = C + D, \\ &ik(A - B) = \kappa(C - D), \\ &Ce^{\kappa b} + De^{-\kappa b} = Fe^{ikb} + Ge^{-ikb}, \\ &\kappa(Ce^{\kappa b} - De^{-\kappa b}) = ik(Fe^{ikb} - Ge^{-ikb}). \end{aligned} \tag{4.2.147}$$

Ez 4 darab egyenlet 6 darab ismeretlen együtthatóra. További összfüggést jelent, ha valamilyen normálási feltételt rovunk ki a hullámfüggvényre. A feladat teljes egyértelműsítése azáltal lehetséges, hogy eldöntjük jobbról balra, vagy balról jobbra haladó részecskét kívánunk-e leírni. Ezeknek az eseteknek rendre az felel meg, hogy

$x \to -\infty$ ill. $x \to +\infty$ esetén csak kifutó részecskét (síkhullámot) látunk. Vegyük az utóbbi esetet, amikor tehát $G = 0$. A harmadik és negyedik folytonossági feltételből

$$C = \frac{F}{2\kappa} e^{ikb-\kappa b}(\kappa + ik), \qquad D = \frac{F}{2\kappa} e^{ikb+\kappa b}(\kappa - ik), \tag{4.2.148}$$

míg az első két feltételi egyenletből

$$A = \frac{F}{4ik\kappa} e^{ikb}\left[e^{-\kappa b}(\kappa + ik)^2 - e^{\kappa b}(\kappa - ik)^2\right], \qquad B = \frac{F}{4ik\kappa} e^{ikb}(e^{\kappa b} - e^{-\kappa b})(\kappa^2 + k^2) \tag{4.2.149}$$

adódik. A potenciálgátról való visszaverődés R ill. az azon való áthaladás T valószínűségét úgy kapjuk, hogy a visszavert hullám j_R ill. az áthaladt hullám j_T valószínűségi áramsűrűségét osztjuk a befutó hullám j_b valószínűségi áramsűrűségével és vesszük a hányados abszolut értékét:

$$R = \left|\frac{j_R}{j_b}\right|, \qquad T = \left|\frac{j_T}{j_b}\right|. \tag{4.2.150}$$

Mivel az egyes valószínűségi áramsűrűségek rendre:

$$\begin{aligned} j_b &= \frac{i\hbar}{2m}|A|^2(e^{ikx}\frac{d}{dx}e^{-ikx} - e^{-ikx}\frac{d}{dx}e^{ikx}) = \frac{\hbar k}{m}|A|^2, \\ j_R &= -\frac{\hbar k}{m}|B|^2, \qquad j_T = \frac{\hbar k}{m}|F|^2, \end{aligned} \tag{4.2.151}$$

ahol a teljes hullámra vonatkozó valószínűségi áram kontinuitása miatt:

$$j_b + j_R = j_T, \qquad |A|^2 - |B|^2 = |F|^2. \tag{4.2.152}$$

Ezek figyelembevételével a keresett valószínűségek, azaz a visszaverődési és az áthaladási együttható:

$$\begin{aligned} R &= \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{|B|^2 + |F|^2}{|A|^2} - \frac{|F|^2}{|A|^2} = 1 - T, \\ T &= \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{16k^2|\kappa|^2}{\left|e^{-\kappa b}(\kappa + ik)^2 - e^{\kappa b}(\kappa - ik)^2\right|^2}, \end{aligned} \tag{4.2.153}$$

ahol $0 \le T \le 1$ és $0 \le R \le 1$. Az egyenlőtlenségek megállapításánál felhasználtuk, hogy R és T definíció szerint nem negatív. A fentiekből a következőket lehet kiolvasni:

1. Ha $E > V_0$, akkor is van visszaverődés. Pl. ha $E \gg V_0$, akkor $\kappa = iK = ik\sqrt{1-\xi}$, ahol $\xi = \frac{V_0}{E} \ll 1$ és

$$T \approx \frac{16k^4(1-\xi)}{16k^4(1-\xi) + 4k^4\xi^2 \sin^2 kb} \approx 1 - \frac{1}{4}\xi^2 \sin^2 kb, \qquad R = \frac{1}{4}\xi^2 \sin^2 kb. \tag{4.2.154}$$

2. Ha $E < V_0$, akkor pedig a részecske csak részben verődik vissza a potenciálgátról, bizonyos valószínűséggel áthalad rajta. Pl. ha $e^{\kappa b} \gg 1$, akkor

$$T \approx \frac{16k^2\kappa^2}{(k^2+\kappa^2)^2} e^{-2\kappa b} = T_0 \exp\{-\frac{2}{\hbar} b\sqrt{2m(V_0 - E)}\} \tag{4.2.155}$$

A potenciálgáton való áthaladás valószínűsége tehát exponenciálisan csökken, ha nő a gát vastagsága ill. magassága.

A potenciálgáton való áthaladás valószínűségére vonatkozó összefüggés tetszőleges alakú potenciálgát esetén

$$T \approx T_0 \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_-}^{x_+} dx\sqrt{2m[V(x) - E]}\right\}, \tag{4.2.156}$$

ahol az integrálás a klasszikus pálya fordulópontjai között történik. Ezen összefüggés alapján olyan fontos jelenségeket lehet értelmezni, mint pl. az atommagok alfa-bomlása és az elektronok kilépése fémből erős külső elektromos tér hatására (hidegemisszió).

4.2.11. Részecske mozgása centrális potenciálban. Kepler törvényei?

Megmaradó mennyiségek. Centrális potenciálról akkor beszélünk, ha a potenciál, ill. a V potenciális energia csak egy centrumtól való r távolság függvénye. Az egyszerűség kedvéért inerciarendszerünk origóját ebbe a centrumba helyezzük. Ekkor a külső potenciáltér gömbszimmetriája miatt célszerű az abban mozgó pontrészecske Schrödinger-egyenletét gömbi polárkoordinátákban felírni. A $V(r)$ potenciálban mozgó részecske Hamilton-operátora koordináta-reprezentációban

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \tag{4.2.157}$$

alakú. Ha felhasználjuk a Δ Laplace-operátor korábban megtanult gömbi polárkoordinátás alakját és annak kapcsolatát a részecske pályaimpulzusmomentumának operátorával, akkor az alábbi stacionárius Schrödinger-egyenletet kapjuk:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{\vec{\ell}}^{\,2}}{2mr^2} + V(r)\right]\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi). \tag{4.2.158}$$

A Hamilton-operátor első tagja, a kinetikus energia operátorának „radiális része”

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) = \frac{1}{2m}\hat{p}_r^2 \tag{4.2.159}$$

alakba írható, ha bevezetjük a $\hat{\vec{p}}$ impulzus radiális irányú komponensét a

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2}(\vec{r}\cdot\hat{\vec{p}} + \hat{\vec{p}}\cdot\vec{r}) = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r}\right) \tag{4.2.160}$$

alakban. Ez az operátor kielégíti a Heisenberg-féle csererelációt,

$$[\hat{r}, \hat{p}_r] = [r, \frac{\hbar}{i}\left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r}\right)] = i\hbar \tag{4.2.161}$$

és önadjungált azon $R(r)$ függvények tere fölött, amelyekre $rR(r) \to 0$, ha $r \to \infty$, azaz amelyekre az $\int_0^\infty r^2 dr |R(r)|^2$ normálási integrál a felső határon nem divergál (négyzetesen integrálható függvények), és amelyek eleget tesznek az $rR(r) \to 0$, ha $r \to 0$ határfeltételnek az origóban. Érdemes megjegyezni, hogy a $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r}$ operátor ugyan kielégíti az $[r, -i\hbar\partial_r] = i\hbar$ csererelációt, de nem önadjungált operátor a négyzetesen integrálható függvények terén. A Hamilton-operátor önadjungáltsága tehát azáltal biztosítható, hogy olyan megoldásait keressük a Schrödinger-egyenletnek, amelyek az origóban eleget tesznek az $r\psi(r, \theta, \varphi) \to 0$ határfeltételnek, ha $r \to 0$.

A gömbszimmetrikus rendszer Hamilton-operátora felcserélhető az $\hat{\vec{\ell}}^{\,2}$ és az $\hat{\ell}_z$ operátorokkal, ahol a z-tengely irányát tetszőlegesen választhatjuk:

$$[\hat{\vec{\ell}}^{\,2}, \hat{H}] = 0, \qquad [\hat{\ell}_z, \hat{H}] = 0. \tag{4.2.162}$$

Ezért **a $\hat{H}$, $\hat{\vec{\ell}}^{\,2}$ és $\hat{\ell}_z$ operátoroknak van közös sajátfüggvény-rendszerük. Ez azt jelenti, hogy hogy az energiasajátállapotok nemcsak jól definiált E energiával, hanem egyúttal jól definiált pályamomentummal, ℓ kvantumszámmal is rendelkeznek és az adott energiájú állapotok mind az impulzusmomentum négyzetének ugyanahhoz az $\hbar^2\ell(\ell+1)$ sajátértékéhez tartoznak.** Ugyanakkor a Hamilton-operátor a gömbszimmetria miatt csak $\hat{\vec{\ell}}^{\,2}$-től függ, de nem függ külön $\hat{\ell}_z$-től, hiszen ha függene tőle, akkor megsérülne a gömbszimmetria. Az adott E, ℓ értékkel jellemzett energiasajátállapotok ezért $2\ell+1$-dimenziós alteret alkotnak. **Minden energiaszinthez $2\ell + 1$ darab lineárisan független állapot tartozik, amelyek csak ℓ_z sajátértékében különböznek. Ezért azt mondjuk, hogy a gömbszimmetria következtében minden energiához az állapotok egy multiplettje tartozik.** Ha $\ell = 0$ ill. $\ell = 1$, akkor speciálisan rendre szingletről ($2 \cdot 0 + 1 = 1$ dimenziós altér) ill. tripletről ($2 \cdot 1 + 1 = 3$ dimenziós altér) beszélünk. **A különböző ℓ-értékekhez tartozó állapotoknak külön neveket is adtak:**

ℓ	elnevezés
0	s-állapot
1	p-állapotok
2	d-állapotok
3	f-állapotok
4	g-állapotok

A radiális hullámegyenlet. **Keressük ezek után a stacionárius állapotokat egy radiális $R_{E,\ell}(r)$ hullámfüggvény és az $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$, csak a szögektől függő impulzusmomentum sajátfüggvények szorzataként,** azaz

$$\psi_{E,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = R_{E,\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \tag{4.2.163}$$

alakban. Behelyettesítve a Schrödinger-egyenletbe nyilvánvalóvá válik, hogy az E energiájú állapot hullámfüggvénye attól is függ, hogy mennyi ℓ értéke, hiszen a Hamilton-operátor az impulzusmomentum négyzetének operátorát is tartalmazza:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2}+V(r)\right]R_{E,\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta,\varphi)=ER_{E,\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta,\varphi), \tag{4.2.164}$$

ahonnan **az alábbi, ún. radiális Schrödinger-egyenletet kapjuk a stacionárius állapot radiális hullámfüggvényére:**

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2}+V(r)\right]R_{E,\ell}(r)=ER_{E,\ell}(r). \tag{4.2.165}$$

Azt várjuk, hogy a stacionárius Schrödinger-egyenlet megoldása álló gömbhullám lesz, ezért kézenfekvő a radiális hullámfüggvényről a gömbhullámok amplitudójának $\frac{1}{r}$- függését leválasztani, azaz feltenni, hogy

$$R(r)=\frac{1}{r}\chi(r). \tag{4.2.166}$$

Helyettesítsük ezt be a radiális hullámegyenletbe és használjuk fel, hogy

$$\begin{aligned}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\frac{\chi(r)}{r}\right)&=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\left(\frac{1}{r}\frac{d\chi}{dr}-\frac{\chi}{r^2}\right)\right)\\&=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{d\chi}{dr}-\chi\right)=\frac{1}{r^2}\left(\frac{d\chi}{dr}+r\frac{d^2\chi}{dr^2}-\frac{d\chi}{dr}\right)\\&=\frac{1}{r}\frac{d^2\chi}{dr^2},\end{aligned} \tag{4.2.167}$$

akkor az alábbi egyenletet kapjuk:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dr^2}+V_{\mathrm{eff}}(r)\chi(r)=E\chi(r), \tag{4.2.168}$$

ahol bevezettük a

$$V_{\mathrm{eff}}(r)=\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2}+V(r) \tag{4.2.169}$$

effektív potenciális energiát.**A $\chi(r)=rR(r)$ radiális hullámfüggvényre olyan egy-dimenziós feladatot kaptunk, amelyikben a potenciális energia szerepét a $V_{\mathrm{eff}}(r)$ effektív potenciális energia játssza. Az utóbbi két tagból tevődik össze, a részecske pályamozgásából származó**

$$\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2} \tag{4.2.170}$$

energiából és abból a $V(r)$ potenciális energiából, amivel a részecske a gömbszimmetrikus külső térben rendelkezik. Ha a részecske s-állapotban van, akkor az effektív potenciális energia megegyezik a részecske potenciális energiájával. Ha $\ell \neq 0$, akkor a pályamozgásból származó tag mindig pozitív, azaz taszítást ír le. Ez azt jelenti, hogy az s-hullám elhelyezkedését a tényleges $V(r)$ potenciális energia határozza meg, míg a p-, $d-$, stb. állapotok radiális hullámfüggvénye az $r = 0$ origóból ,,kitaszítódik" még akkor is, ha $V(r)$ az egész tartományon vonzó jellegű.

A radiális hullámegyenlet megoldása akkor válik egyértelművé, ha megmondjuk, hogy a hullámfüggvénynek $r = 0$-ban és $r \to \infty$ esetén milyen határfeltételeket kell kielégítenie. A kinetikus energia operátorának radiális része, ill. a radiális impulzuskomponens operátora akkor és csak akkor önadjungált, ha teljesül az origóban a $\chi(0) = 0$ határfeltétel. Ezért **olyan megoldásokat fogunk keresni, amelyekre**

$$\chi(0) = 0. \tag{4.2.171}$$

A realisztikus potenciálok olyanok, hogy $r^2V(r) \to 0$, ha $r \to 0$. Ilyen a Coulomb-potenciál és ilyen a harmonikus oszcillátor potenciálja is. Ekkor a radiális Schrödinger-egyenlet az origó körüli tartományban

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2}\chi = 0 \tag{4.2.172}$$

alakú, ha csak a vezető rendű tagokat őrizzük meg. Keressük a megoldást az origó környezetében $\chi \sim r^a$ alakban. Ekkor

$$a(a-1) = \ell(\ell+1) \tag{4.2.173}$$

adódik az ismeretlen a kitevőre. Az egyenletnek 2 megoldása van, $a = \ell + 1$ és $a = -\ell$. Az utóbbi megoldás azonban ℓ semmilyen értéke esetén nem tesz eleget az origóban kirótt határfeltételnek. **Ezért a határfeltételt is kielégítő egyetlen megoldás a potenciál centrumának közelében**

$$\chi(r) \sim r^{\ell+1}, \quad \Rightarrow \quad R(r) \sim r^{\ell} \tag{4.2.174}$$

alakú.

Válasszuk a továbbiakban a potenciális energia nullszintjét a végtelenben: $V(r) \to 0$, ha $r \to \infty$. Ekkor a végtelenben az effektív potenciális energia is zérushoz tart. A megoldás tulajdonságai hasonlóak, mint az egy-dimenziós mozgások általános tulajdonságai. **Két esetet kell megkülönböztetni, amikor az energia negatív, $E < 0$. ill. amikor az energia pozitív, $E > 0$. A negatív energia-sajátértékekhez tartozó megoldások a kötött állapotok, a pozitívakhoz tartozók a nem kötött, más néven szórási állapotok.** Itt most a kötött állapotokkkal foglalkozunk részletesen. A szórási állapotokra később fogunk visszatérni.

Kötött állapotok. Ha vannak negatív energiájú stacionárius állapotok, akkor azokat kötött állapotoknak nevezzük. Megmutatható ugyanis, hogy ilyenkor a hullámfüggvény $r \to \infty$ távolságokon exponenciálisan lecseng, úgyhogy a részecske $|\psi(r,\theta,\varphi)|^2 dV$ megtalálási valószínűsége a potenciál centruma közelében lesz csak számottevő és attól nagy távolságokban exponenciálisan lecseng.

Legyen $E = -\epsilon < 0$ egy sajátérték és $r \to \infty$. Ebben, a potenciál centrumától távoli tartományban a radiális Schrödinger-egyenlet

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi_{\mathrm{as}z}(r)}{dr^2} = -\epsilon\chi_{\mathrm{as}z}(r) \tag{4.2.175}$$

alakot ölt. Átrendezve:

$$\frac{d^2\chi_{\mathrm{as}z}(r)}{dr^2} = \frac{2m\epsilon}{\hbar^2}\chi_{\mathrm{as}z}(r) \equiv \alpha^2\chi_{\mathrm{as}z}(r), \tag{4.2.176}$$

aminek a független megoldásai:

$$e^{-\alpha r}, \quad e^{\alpha r} \tag{4.2.177}$$

alakúak. Nyilvánvaló azonban, hogy a pozitív kitevős aszimptotikus viselkedést fizikai állapot nem mutathatja, mert akkor nem lesz négyzetesen integrálható a hullámfüggvény. Ezért a $\chi(r)$ hullámfüggvény az aszimptotikus tartományban ($r \to \infty$)

$$\chi_{\mathrm{as}z}(r) \sim e^{-\alpha r}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}} > 0 \tag{4.2.178}$$

törvény szerint lecseng. Ezt akartuk belátni.

Meg lehet mutatni, hogy - ha egyáltalán léteznek, akkor - a negatív energiás stacionárius megoldások, azaz **a kötött állapotok energiaspektruma diszkrét.** Indexelhetjük őket az $n_r = 0, 1, 2, \ldots$ nem negatív egész számokkal az energiájuk szerint szigorúan monoton növekvő sorrendben haladva, a legalacsonyabb $n_r = 0$-val indexelt energiaszinttől kezdve. A megfelelő $\chi(r)$ megoldások is hordozzák ezt az n_r indexet, amelyet **radiális kvantumszámnak** nevezünk. Ez - az egydimenziós stacionárius megoldásokra vonatkozó csomóponti tétel értelmében azt is jelenti, hogy az E_{n_r} energiaszinthez tartozó $\chi_{n_r,\ell}(r)$ hullámfüggvénynek a $(0,\infty)$ nyílt intervallumban n_r darab zérushelye van. Következésképpen az $R_{n_r,\ell}$ **radiális hullámfüggvénnyel leírt, álló gömbhullámnak n_r darab csomófelülete van, amelyek a potenciál centruma, mint origó körül elhelyezkedő koncentrikus gömbfelületek.**

Kepler törvényei? **Ahhoz, hogy Kepler[47] törvényeiről beszélhessünk, az kell, hogy a centrális potenciálban mozgó részecskére teljesüljenek a klasszikusság feltételei, amelyeket az Ehrenfest-tételek kapcsán említettünk.** Ehhez azonban nem stacionárius állapotot kell vizsgálni, hanem az időtől függő Schrödinger-egyenlet olyan megoldásait, amikor a részecskét leíró kezdeti hullámcsomag

[47] Johannes Kepler (1571-1630, német) felfedezte a bolygómozgás törvényeit. További fontos eredménye a fénytörés kis szögekre érvényes törvénye, A Galilei-távcső elmélete és a Kepler-távcső. Pontos méréseivel jelentősen hozzájárult a heliocentrikus csillagászat (világkép) igazságának elfogadottá válásához.

erősen lokalizált, azaz amikor a hullámcsomag mérete sokkal kisebb, mint a hullámcsomag középpontjának a potenciál centrumától mért távolsága. Pl. a Föld $R_F \approx 6 \cdot 10^6$ m sugara sokkal kisebb, mint az $R_{F,N} \approx 10^{11}$ m Föld-Nap távolság. Mivel a Föld tömege $m_F \approx 6 \cdot 10^{24}$ kg, a Föld hullámcsomagjának szétfolyási ideje $\tau = 2 \cdot 10^{72}$ s, a klasszikussághoz szükséges minimális kinetikus energia pedig $T_{\mathrm{min}} \approx 10^{-107}$ J. Nyilvánvaló, hogy ezért a Föld a Nap körül klasszikus mozgást végez. Mint azt az elektronra vonatkozó hasonló becslések mutatják, az elektron a proton Coulomb-terében biztosan nagyon határozottan kvantumfizikai viselkedést mutat, különösen, ha kötött állapotban van. Az elektron kötési energiája a H-atom alapállapotában pl. 13 eV, ami úgy jön létre, hogy az elektronnak átlagosan -26 eV potenciális energiája és $+13$ eV kinetikus energiája van. Az utóbbi elenyészően kicsiny a klasszikus viselkedéshez minimálisan szükséges, korábban már megbecsült, $T_{\mathrm{min}} \sim 30$ GeV nagyságrendű kinetikus energiához képest.

4.2.12. Hidrogénatom

A hidrogén-atom és a klasszikus fizika. A hidrogén-atom (H-atom) első közelítésben egy olyan kötött rendszer, amelyben egy elektron helyezkedik el a pozitív töltésű atommag, a proton környezetében. A protonnak 3 nagyságrenddel nagyobb a nyugalmi tömege ($m_p c^2 = 1$ GeV) mint az elektronnak ($m_e c^2 = 511$ keV). Ezért az atom tömegközéppontja jó közelítéssel az atommagban, a protonban van. Első közelítésben mind a protont, mind az elektront pontszerűnek tekinthetjük. A proton, pozitív $e > 0$ töltésénél fogva centrális Coulomb-potenciálteret hoz létre. Ebben helyezkedik el az elektron, amelynek $-e$ a töltése és így a potenciális energiája

$$-\alpha \frac{e^2}{r}, \tag{4.2.179}$$

ha r az elektron távolsága a protontól; α az egységrendszer megválasztásától függő állandó.

A klasszikus mechanikai felfogás szerint az atommag Coulomb-potenciáljában elhelyezkedő elektronra sugárirányú vonzó erő hat, amely azt a centripetális gyorsulást tudja fenntartani Newton II. törvénye értelmében, ami ahhoz szükséges, hogy az elektron körpályán maradjon,

$$\alpha \frac{e^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r}, \tag{4.2.180}$$

ahol v az elektron kerületi sebessége. Ha az elektron megmaradó energiája $E < 0$, akkor erre

$$-\alpha \frac{e^2}{r} + \frac{1}{2} m_e v^2 = E, \tag{4.2.181}$$

ahonnan

$$\frac{m_e v^2}{r} = 2\left(\frac{E}{r} + \alpha \frac{e^2}{r^2}\right). \tag{4.2.182}$$

Ezt Newton II. törvényével összehasonlítva,

$$\alpha \frac{e^2}{r^2} = -\frac{2E}{r} \tag{4.2.183}$$

adódik, úgyhogy az $E < 0$ energiájú elektronnak

$$r = \alpha \frac{e^2}{-2E} \tag{4.2.184}$$

sugarú körpályán kellene mozognia.

Ez a klasszikus fizikai kép teljesen ellentmond a H-atomra vonatkozó kísérleti tapasztalatoknak. Először azért, mert mint klasszikus fizikai modell sem lehet helyes, hiszen **a körpályán mozgó elektron gyorsul, a gyorsuló töltés pedig a klasszikus elektrodinamika szerint elektromágneses sugárzást kelt.** Ha tehát kiegészítjük a klasszikus fizikai modellünket ezzel a sugárzással, akkor az elektronnak el kellene veszítenie elektromágneses sugárzás révén az energiáját és bele kellene zuhannia a protonba. (A körpálya sugarára vonatkozó képletben $E \to -\infty$ esetén $r \to 0$.) **A klasszikus fizikán alapuló modell tehát nem tudja megmagyarázni, hogy miért stabil rendszer a H-atom.** Másodszor azért sem helyes a klasszikus modell, mert ez megengedné, hogy az elektron E energiája bármilyen negatív érték legyen. Ez egyúttal azt is jelentené, hogy tetszőleges energiát lehetne közölni, pl. elektromágnesesen az elektronnal, ill. hogy ugyanígy a gerjesztett H-atom tetszőleges energiát tudna leadni. Megvizsgálták ugyanakkor, hogy magas hőmérsékletű, H-atomokból álló gáz (hidrogén-lámpa) milyen elektromágneses sugárzást bocsát ki. Azt tapasztalták, hogy csak diszkrét frekvenciájú, azaz csak meghatározott diszkrét energiaadagoknak megfelelő sugárzást bocsát ki. Ebből arra kell következtetni, hogy **az elektronnak a H-atomban csak diszkrét energiájú kötött állapotai vannak, ezt a tapasztalati tényt pedig a klasszikus fizika nem tudja megmagyarázni.**

A tömegközéppont mozgásának leválasztása. **A H-atom szerkezetének, tulajdonságainak ellentmondásmentes magyarázata a kvantummechanika keretében vált lehetségessé. Ez is a kvantummechanika helyességét igazolja.**

A centrális potenciálban elhelyezkedő pontrészecske stacionárius állapotaira vonatkozó korábbi ismereteinket kell csak alkalmazni. Annyiban kell óvatosan eljárnunk, hogy a proton nincsen lerögzítve, ezért **a feladat valójában a protonból és az elektronból álló 2-részecskés rendszer leírása. Megmutatjuk, hogy ez a feladat visszavezethető egy részecske centrális potenciálban történő mozgására, hasonlóan mint ahogy a klasszikus mechanikai kéttest-feladat is visszavezethető egy-részecskés feladatra.** A H-atom Hamilton-operátora:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_p}\Delta_{\vec{r}_p} - \frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_{\vec{r}_e} - \alpha \frac{e^2}{|\vec{r}_p - \vec{r}_e|}, \tag{4.2.185}$$

ahol $\vec{r}_p$ és $\vec{r}_e$ rendre a proton, ill. az elektron helyzetvektora. Vezessük be a proton-elektron rendszer tömegközéppontjának $\vec{R}$ helyzetvektorát és a $\vec{r}$ relatív helyzetvektort:

$$\vec{R} = \frac{m_p\vec{r}_p + m_e\vec{r}_e}{m_p + m_e}, \qquad \vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_p. \tag{4.2.186}$$

Az új változók segítségével a Hamilton-operátorban szeparálódik a tömegközéppont helyzetvektorától és a relatív helyzetvektortól való függés:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2(m_p + m_e)}\Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}} - \alpha\frac{e^2}{r}, \tag{4.2.187}$$

ahol

$$\mu = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} \tag{4.2.188}$$

a problémához tartozó **redukált tömeg.**

Felhasználtuk, hogy

$$\vec{\nabla}_{\vec{r}_p} = \frac{m_p}{m_p + m_e}\vec{\nabla}_{\vec{R}} - \vec{\nabla}_{\vec{r}}, \quad \vec{\nabla}_{\vec{r}_e} = \frac{m_e}{m_p + m_e}\vec{\nabla}_{\vec{R}} + \vec{\nabla}_{\vec{r}}, \tag{4.2.189}$$

úgyhogy a kinetikus energia operátora

$$\begin{aligned}
\hat{T} &= -\frac{\hbar^2}{2m_p}\Delta_{\vec{r}_p} - \frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_{\vec{r}_e} \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m_p}\left(\frac{m_p^2}{(m_p+m_e)^2}\Delta_{\vec{R}} + \Delta_{\vec{r}} - 2\frac{m_p}{m_p+m_e}\vec{\nabla}_{\vec{R}}\cdot\vec{\nabla}_{\vec{r}}\right) - \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{m_e^2}{(m_p+m_e)^2}\Delta_{\vec{R}} + \Delta_{\vec{r}} + 2\frac{m_e}{m_p+m_e}\vec{\nabla}_{\vec{R}}\cdot\vec{\nabla}_{\vec{r}}\right. \\
&= -\frac{\hbar^2}{2(m_p+m_e)}\Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m_p} + \frac{1}{m_e}\right)\Delta_{\vec{r}} \\
&= -\frac{\hbar^2}{2(m_p+m_e)}\Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}}.
\end{aligned} \tag{4.2.190}$$

Mivel a Hamilton-operátorban szét tudtuk választani a tömegközépponti és a relatív helyzetvektortól való függést, a

$$\hat{H}\psi(\vec{R},\vec{r}) = E_{atom}\psi(\vec{R},\vec{r}) \tag{4.2.191}$$

stacionárius Schrödinger egyenlet megoldását a

$$\psi(\vec{R},\vec{r}) = \Phi(\vec{R})\phi(\vec{r}) \tag{4.2.192}$$

szeparált alakban keressük. Ekkor

$$\begin{aligned}
\left(-\frac{\hbar^2}{2(m_p+m_e)}\Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}} + V(r)\right)\Phi(\vec{R})\phi(\vec{r}) &= E_{\text{atom}}\Phi(\vec{R})\phi(\vec{r}), \\
-\frac{\hbar^2}{2(m_p+m_e)}\frac{\Delta_{\vec{R}}\Phi(\vec{R})}{\Phi(\vec{R})} + \frac{1}{\phi(\vec{r})}\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}} + V(r)\right)\phi(\vec{r}) &= E_{\text{atom}}.
\end{aligned} \tag{4.2.193}$$

Ez az egyenlet akkor és csak akkor állhat fenn, ha a baloldalon álló két tag, amelyek egyike csak $\vec{R}$-től, másika csak $\vec{r}$-től függ, külön-külön állandó. Legyen $E_{\mathrm{T}KP}$ az első tag értéke, akkor

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_p+m_e)}\Delta_{\vec{R}}\Phi(\vec{R}) = E_{\mathrm{T}KP}\Phi(\vec{R}), \tag{4.2.194}$$

ahol a $\Phi(\vec{R})$ hullámfüggvény a H-atom egészének, azaz aTKP-jának a szabad mozgását írja le. Mivel a TKP szabad mozgásának Hamilton-operátora felcserélhető a TKP impulzusának $\hat{\vec{P}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{\vec{R}}$ operátorával, azért a közös sajátfüggvények a TKP impulzusának $\vec{P}$ sajátértékéhez tartozó síkhullám-megoldások:

$$\Phi(\vec{R}) = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{P}\cdot\vec{R}}, \tag{4.2.195}$$

és a megfelelő energia-sajátérték

$$E_{\mathrm{T}KP} = \frac{\vec{P}^2}{2(m_p+m_e)}. \tag{4.2.196}$$

Ekkor az elektronnak az atommaghoz képesti relatív mozgását leíró $\phi(\vec{r})$ hullámfüggvényre, azaz a H-atomon belüli belső mozgásra vonatkozó hullámfüggvényre a

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}} - \alpha\frac{e^2}{r}\right]\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r}) \tag{4.2.197}$$

alakú stacionárius Schrödinger-egyenletet kapjuk, ahol E a H-atom energiája az atom tömegközépponti rendszerében:

$$E_{atom} = \frac{\vec{P}^{\,2}}{2(m_p+m_e)} + E. \tag{4.2.198}$$

A továbbiakban tehát elegendő a relatív mozgás hullámfüggvényét meghatározni, hiszen tudjuk, hogy a tömegközéppont mozgását síkhullám írja le. **A relatív mozgás hullámfüggvényére kapott Schrödinger-egyenlet viszont alakilag egy egyrészecskés feladat stacionárius Schrödinger-egyenlete.** Ettől kezdve már alkalmazhatjuk az előző fejezetben tanultakat.

A relatív mozgás hullámfüggvénye és a kötött állapotok. Mivel a relatív mozgást leíró

$$\hat{H}_{\mathrm{rel}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2\hat{\ell}^{\,2}}{2\mu r^2} - \alpha\frac{e^2}{r} \tag{4.2.199}$$

Hamilton-operátor felcserélhető az elektron pályaimpulzusmomentuma négyzetének operátorával és a pályaimpulzusmomentum tetszőleges, z-tengelyre vett vetületének az operátorával,

$$[\hat{H}_{\mathrm{rel}}, \hat{\ell}^{\,2}] = 0, \qquad [\hat{H}_{\mathrm{rel}}, \hat{\ell}_z] = 0, \tag{4.2.200}$$

azért a relatív mozgás Hamilton-operátorának és az $\hat{\vec{\ell}}^{\,2}$ és $\hat{\ell}_z$ operátoroknak van közös sajátfüggvény-rendszere. A relatív mozgás hullámfüggvénye tehát

$$\phi_{E,\ell,m}(\vec{r}) = R_{E,\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \tag{4.2.201}$$

alakú, ahol $\hbar^2 \ell(\ell+1)$ és $\hbar m$ rendre az impulzusmomentum négyzetének és z-irányú vetületének a sajátértékei. Az $R_{E,\ell}$ radiális hullámfüggvényre vonatkozó hullámegyenlet most

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - \alpha \frac{e^2}{r} \right] R_{E,\ell}(r) = E R_{E,\ell}(r). \tag{4.2.202}$$

Hozzuk ezt

$$\frac{d^2 R_{E,\ell}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{E,\ell}(r)}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R_{E,\ell}(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \alpha \frac{e^2}{r} \right) R_{E,\ell}(r) = 0 \tag{4.2.203}$$

alakra. Vezessük be az

$$E' = \frac{\hbar^2}{\mu \alpha^2 e^4} E, \qquad r' = \frac{\mu \alpha e^2}{\hbar^2} r, \qquad R'_{E',\ell}(r') = \left[\frac{\mu \alpha e^2}{\hbar^2} \right]^2 R_{E,\ell}(r) \tag{4.2.204}$$

jelöléseket, akkor

$$\frac{d^2 R'_{E',\ell}(r')}{dr'^{\,2}} + \frac{2}{r'} \frac{dR'_{E',\ell}(r')}{dr'} - \frac{\ell(\ell+1)}{r'^{\,2}} R'_{E',\ell}(r') + 2 \left(E' + \frac{1}{r'} \right) R'_{E',\ell}(r') = 0. \tag{4.2.205}$$

A kötött állapotok azok, amelyeknek az energiája negatív (ha a potenciális energia additív állandóját úgy választottuk, hogy a potenciális energia a végtelenben nullává váljon: $V \to 0$, ha $r' \to \infty$). Ezt onnan látjuk, hogy $r' \to \infty$ esetén a radiális hullámfüggvényre vonatkozó differenciálegyenlet

$$\frac{d^2 R'_{E',\ell}(r')}{dr'^{\,2}} = -2E' R'_{E',\ell}(r') \tag{4.2.206}$$

alakot ölt. Így az aszimptotikusan távoli tartományban a radiális hullámfüggvény exponenciális függvény:

$$R'_{E',\ell}(r') \sim \exp\{\pm\sqrt{-2E'} r'\}. \tag{4.2.207}$$

Ha az energia negatív, azaz $E' < 0$, akkor, és csak akkor, az exponenciális függvény kitevője valós. A hullámfüggvénynek négyzetesen integrálhatónak kell lennie, amiből következik, hogy csak a négyzetgyök előtti negatív előjel felel meg fizikai megoldásnak. **A negatív energiasajátértékekhez tartozó stacionárius állapotok hullámfüggvényei tehát a H-atom TKP-jától távol exponenciálisan lecsengő állóhullámot írnak le. Az exponenciális lecsengés mértékét az**

energiasajátérték határozza meg: minél kisebb $|E'|$, azaz minél magasabban gerjesztett állapotról van szó, annál lassabban cseng le a hullámfüggvény az atom TKP-jától távolodva.

Ezzel szemben, **ha az energia pozitív, azaz $E' > 0$, akkor** a radiális hullámfüggvény kitevője nagy r távolságokban tisztán képzetes és a kapott megoldás egy nem normálható, haladó hullámot ír le (be- vagy kifutó gömbhullámot). Ilyenkor **fizikai állapotokat sok, többnyire végtelen sok ki- vagy befutó gömbhullám lineáris szuperpozíciójaként lehet előállítani,** s az egy a TKP felé közeledő, vagy attól távolodó hullámcsomagot fog leírni. **Az ilyen állapotú elektron a mozgás során nincsen a tér korlátos tartományára korlátozva. A kapott állapotok ún. szórási állapotok.**

A jelen fejezetben a kötött állapotokkal foglalkozunk. Mivel az energia negatív, $E' < 0$, vezessük be a további

$$n = \frac{1}{\sqrt{-2E'}}, \qquad \rho = \frac{2r'}{n}, \qquad \mathcal{R}_{n,\ell}(\rho) = R'_{E',\ell}(r') \tag{4.2.208}$$

átjelöléseket:

$$\frac{d^2\mathcal{R}_{n,\ell}(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d\mathcal{R}_{n,\ell}(\rho)}{d\rho} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right]\mathcal{R}_{n,\ell}(\rho) = 0. \tag{4.2.209}$$

A megoldást úgy keressük, hogy **figyelembe vesszük a radiális hullámfüggvényre vonatkozó határfeltételeket az origóban és a végtelenben.** A hullámfüggvény korlátossága az origóban az $\mathcal{R}_{n,\ell}(\rho) \sim \rho^\ell$ viselkedést eredményezi. A végtelenben a viselkedést úgy olvashatjuk le, hogy elhagyjuk az $1/\rho$-val és $1/\rho^2$-tel arányos tagokat:

$$\frac{d^2\mathcal{R}_{n,\ell}(\rho)}{d\rho^2} - \frac{1}{4}\mathcal{R}_{n,\ell}(\rho) = 0, \tag{4.2.210}$$

ahonnan $\mathcal{R}_{n,\ell}(\rho) \sim e^{\pm\frac{1}{2}\rho}$, de ezek közül csak $\mathcal{R}_{n,\ell}(\rho) \sim e^{-\frac{1}{2}\rho}$ ad normálható hullámfüggvényt. Mindezeket figyelembe véve a megoldást

$$\mathcal{R}_{n,\ell}(\rho) = \rho^\ell e^{-\frac{1}{2}\rho} w_{n,\ell}(\rho) \tag{4.2.211}$$

alakban keressük, ahol $w(\rho)$-nak az origóban végesnek kell maradnia, a végtelenben meg nem szabad gyorsabban növekednie, mint ρ valamely véges hatványának, és eleget kell tennie a

$$\rho\frac{d^2w(\rho)}{d\rho^2} + (2\ell + 2 - \rho)\frac{dw(\rho)}{d\rho} + (n - \ell - 1)w(\rho) = 0 \tag{4.2.212}$$

differenciálegyenletnek. A szóban forgó differenciálegyenlet a felsőbb matematikában jól ismert differenciálegyenlet, amelynek (az origóban nem szinguláris) megoldásai

az $w_{n,\ell}(\rho) = F(-n+\ell+1, 2\ell+2, \rho)$ elfajult hipergeometrikus függvények. Ezek azonban akkor és csak akkor nem növekednek $\rho \to \infty$ esetén gyorsabban, mint ρ valamely véges hatványa, ha

$$n - \ell - 1 \geq 0 \quad \text{és egész szám.} \tag{4.2.213}$$

Mivel ℓ egész szám, azért innen $n \geq \ell+1$ is egész szám. **A megoldások tehát olyan úgynevezett elfajult hipergeometrikus függvények,** $w_{n,\ell}(\rho) = F(-n+\ell+1, 2\ell+2, \rho)$**, amelyeknek első paramétere nem pozitív egész szám, második paramétere** $0 < 2\ell+2$ **egész szám. Ezek a függvények normálási együtthatótól eltekintve az úgynevezett általánosított Laguerre-polinomokkal azonosak,** $w_{n,\ell}(\rho) =$ const. $L^{2\ell+1}_{n+\ell}(\rho)$. **Utóbbiak** $(n-\ell-1)$**-edrendű polinomok.** A radiális hullámfüggvények valósak és normálásuk

$$1 = \int_0^\infty r^2 dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta R^2_{n,\ell}(r) |Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)|^2 = \int_0^\infty r^2 dr R^2_{n,\ell}(r) \tag{4.2.214}$$

egyenlőség megkövetelése révén történik.

Az általánosított $L^m_n(z)$ Laguerre-polinomok az $\alpha = -(n-m)$, $\gamma = m+1$ paraméterértékekhez tartozó $F(\alpha,\gamma,z)$ elfajult hipergeometrikus függvényekkel egyeznek meg normálási tényezőtől eltekintve:

$$L^m_n(z) = (-1)^m \frac{(n!)^2}{m!(n-m)!} F(-(n-m), m+1, z) = \frac{n!}{(n-m)!} e^z \frac{d^n}{dz^n}(e^{-z} z^{n-m}). \tag{4.2.215}$$

Itt $F(\alpha,\gamma,z)$ az elfajult hipergeometrikus függvény,

$$F(\alpha,\gamma,z) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma}\frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{z^2}{2!} + \dots \tag{4.2.216}$$

, ami tetszőleges α komplex paraméter és $\gamma \neq 0, -1, -2, \dots$ komplex paraméter esetén konvergál a z komplex változó minden véges értéke esetén. Ha α nem pozitív egész szám, akkor $F(\alpha,\gamma,z)$ a z változó $|\alpha|$-adrendű polinomja. Az $F(\alpha,\gamma,z)$ függvény kielégíti a

$$zu'' + (\gamma - z)u' - \alpha u = 0 \tag{4.2.217}$$

közönséges másodrendű differenciálegyenletet. Ennek az egyenletnek van az $F(\alpha,\gamma,z)$ megoldástól lineárisan független másik megoldása is, $z^{1-\gamma}F(\alpha-\gamma+1, 2-\gamma, z)$. Amíg az $F(\alpha,\gamma,z)$ megoldás a $z=0$-ban analitikus, addig a $z^{1-\gamma}F(\alpha-\gamma+1, 2-\gamma, z)$ megoldásnak a $z=0$ pontban pólusa van. Ha $\alpha = -n \geq 0$ nem pozitív egész szám, akkor $F(-n,\gamma,z)$ n-edrendű polinom, és ha emellett még $\gamma = m$, ahol m egész szám és $0 \leq m \leq n$, akkor $F(-n,m,z)$ szorzótényező erejéig azonos az $L^m_n(z)$ általánosított Laguerre-polinommal. Az $L^{m=0}_n(z)$ általánosított Laguerre-polinomot szokás Laguerre-polinomnak nevezni és $L_n(z)$-vel jelölni, utóbbiak explicit alakja

$$L_n(z) = e^z \frac{d^n}{dz^n}(e^{-z} z^n). \tag{4.2.218}$$

Az energiasajátértékeket az $n = 1, 2, \dots$ **ún. főkvantumszám sorszámozza növekvő sorrendben:**

$$E' = -\frac{1}{2n^2}, \quad \text{ill.} \quad E = -\frac{\mu\alpha^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} \approx \frac{27\ \text{eV}}{2n^2}. \tag{4.2.219}$$

Az $E' = -\frac{1}{2}$ energiájú alapállapot és az $E' = 0$ energiaszint között végtelen sok energiaszintet találunk, amelyek mind kötött állapotokhoz tartoznak, és amelyek egyre sűrűbben helyezkednek el az energiatengelyen az energia növekedtével. Az energiasajátérték nem függ a pályamomentum négyzetének sajátértékétől, azaz ℓ-től. Mivel akkor és csak akkor van stacionárius megoldás, ha $n - 1 \geq \ell$, ezért az egyes energiaszintek csak a pályamomentum négyzetének véges sok értéke,

$$\ell = 0, 1, \ldots, n - 1 \tag{4.2.220}$$

mellett valósulhatnak meg:

Főkvantumszám	Lehetséges állapotok
$n = 1$	s
$n = 2$	s,p
$n = 3$	s,p,d
$\vdots$	

Mivel minden ℓ esetén a pályamomentum z-irányú vetületének a sajátértéke $2\ell + 1$ értéket vehet fel, ezért egy energiaszint elfajultsága:

$$\sum_{\ell=0}^{n-1}(2\ell + 1) = n^2. \tag{4.2.221}$$

Ha még azt is figyelembe vesszük, hogy az elektronok a spinállapotuk tekintetében minden esetben kétféle állapotban lehetnek (a spin $z-$irányú vetülete $\pm\frac{1}{2}\hbar$ lehet), akkor a tulajdonképpeni elfajultság mértéke $2n^2$.

Az $R_{n,\ell}(r)$ radiális hullámüggvényeknek $n_r = n-\ell-1$ csomópontjuk van, ill. a belső mozgást leíró álló gömbhullámoknak ennyi csomófelületük, amelyek a H-atom TKP-ja, mint origó körül elhelyezkedő, koncentrikus gömbfelületek. Láttuk, hogy a radiális hullámfüggvények exponenciálisan lecsengenek nagy r távolságban, s ezzel együtt a térfogategységben való megtalálási valószínűség is exponenciálisan lecseng az aszimptotikus tartományban:

$$\begin{aligned} &\sim \quad r^2 dr\mathcal{P}(r)e^{-\rho} \sim r^2 dr\mathcal{P}(r)e^{-\frac{2r'}{n}} \sim r^2 dr\mathcal{P}(r)\exp\left\{-\frac{2\mu\alpha e^2}{n\hbar^2}r\right\} \\ &\sim \quad r^2 dr\mathcal{P}(r)\exp\left\{-\frac{2r}{nr_B}\right\}, \end{aligned} \tag{4.2.222}$$

ahol

$$r_B = \frac{\hbar^2}{\mu\alpha e^2} \approx 0,5 \cdot 10^{-10}\ \mathrm{m} \tag{4.2.223}$$

az ún. **Bohr-sugár,** és $\mathcal{P}(r)$ az r radiális koordináta véges rendű polinomja. Látjuk, hogy a találati valószínűség radiális irányú exponenciális lecsengésének karakterisztikus távolsága nr_B, növekvő főkvantumszámmal a lecsengés egyre lassabb.

Korábbi jelöléseinket a Bohr-sugár bevezetése után az alábbi alkba írhatjuk:

$$r' = \frac{r}{r_B}, \quad R'(r') = r_B^{-2} R(r), \quad E' = \frac{r_B}{\alpha e^2} E. \tag{4.2.224}$$

Alább megadjuk a radiális hullámfüggvény alakját az alap- és az első néhány gerjesztett állapotban és az elektron-proton távolságnak, ill. a négyzetének a várható értékét ezekben az állapotokban:

n, ℓ	$r_B^{7/2} R'_{n,\ell}(r')$	$\bar{r}$	$\overline{r^2}$	$dw \sim$
$1, 0$	$2e^{-r'}$	$\frac{3}{2} r_B$	$3r_B^2$	$r'^{\,2} e^{-2r'} dr'$
$2, 0$	$\frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{1}{2}r'} \left(1 - \frac{1}{2} r'\right)$	$6r_B$	$42r_B^2$	$r'^{\,2} \left(1 - \frac{1}{2} r'\right)^2 e^{-r'} dr'$
$2, 1$	$\frac{1}{2\sqrt{6}} e^{-\frac{1}{2}r'} r'$	$5r_B$	$30r_B^2$	$r'^{\,4} e^{-r'} dr'$

Látjuk, hogy a Bohr-sugár nagyságrendileg egyenlő az alapállapotban az elektronnak a protontól mért átlagos távolságától. Az utolsó oszlopban feltüntettük annak a dw valószínűségét (konstans szorzótól eltekintve), hogy az elektron az $(r, r + dr)$ infinitezimális intervallummal meghatározott gömbhéjban tartózkodik. Látjuk, hogy az origóban (az atom TKP-jában) a találati valószínűség eltűnik és az origótól nagy távolságban exponenciálisan lecseng. Az $1s$ és a $2p$ állapot esetében a hullámfüggvénynek nincsen csomófelülete az $r \in (0, \infty)$ nyílt intervallumban, az $2s$ állapot esetében pedig $2 - 0 - 1 = 1$ darab csomófelület van, amelynek sugara $r = 2r_B$.

A H-atom alapállapotának leírása. Az ($n = 1$, $\ell = m = 0$) alapállapotban az elektron impulzusmomentuma zérus. Ez felfogható úgy is, mint annak a következménye, hogy **a H-atom alapállapotában az elektron valószínűségi áramsűrűsége zérus:**

$$\vec{j} = \frac{\hbar i}{2\mu} (\psi_{100} \vec{\nabla} \psi_{100}^* - \psi_{100}^* \vec{\nabla} \psi_{100}) = 0, \tag{4.2.225}$$

ami nullának adódik, mert az alapállapot hullámfüggvénye,

$$\psi_{100} = R_{1,0}(r) Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{1,0}(r) \tag{4.2.226}$$

valós[48].

A H-atom alapállapota s-állapot, ezért gömbszimmetrikus. A hullámfüggvény nem függ a θ és φ szögektől. **Az alapállapotú H-atomban nem folyik sem valószínűségi áram, sem töltésáram.** Az utóbbi a valószínűségi áramnak és az elektron $-e$ töltésének ($e > 0$) a szorzata. Az elektron töltéssűrűsége a H-atomban $\rho_e = -e|\psi_{100}(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}|^2 = -eR_{1,0}^2(r)$ nem függ az időtől, sztatikus, a töltésáram sűrűsége pedig zérus. **A H-atom alapállapotában az elektron tehát csak sztatikus elektromos mezőt hoz létre, az alapállapotú H-atom stabil az elektromágneses sugárzással történő elbomlással szemben.**

Az elektronnak, noha nem áramlik, mégis van kinetikus energiája a H-atom alapállapotában. A kinetikus energia abból származik, hogy az elektron nem homogén módon tölti ki a teret, hanem a hullámfüggvényének gradiense van: **az elektron „nyüzsög", vagy másszóval zérusponti kvantumfluktuációi vannak. Ez a nyüzsgés a határozatlansági reláció következménye.** Minél inkább be akarja vonzani a Coulomb-erő az elektront a proton közelébe, annál kisebb Δr sugarú tartományra lesz az elektron lokalizálva, azaz annál kisebb lesz a helybizonytalansága. A határozatlansági reláció értelmében azonban ekkor megnő az elektron impulzusbizonytalansága $\Delta p \sim \hbar/\Delta r$ szerint. Így az elektron energiája közelítőleg

$$E(\Delta r) \approx \frac{(\Delta p)^2}{2\mu} - \alpha\frac{e^2}{\Delta r} \approx \frac{\hbar^2}{2\mu(\Delta r)^2} - \alpha\frac{e^2}{\Delta r} \tag{4.2.227}$$

összefüggés szerint függ az elektron helybizonytalanságától, ami nagyságrendileg azonos az elektronnak a protontól mért átlagos távolságától. A Természet ezt a helybizonytalanságot úgy állítja be, hogy az elektron energiája minimális legyen:

$$\frac{dE(\Delta r)}{d\,\Delta r} = -\frac{\hbar^2}{\mu(\Delta r)^3} + \alpha\frac{e^2}{(\Delta r)^2} = 0 \tag{4.2.228}$$

ahonnan

$$\Delta r \approx \frac{\hbar^2}{\mu\alpha e^2} = r_B. \tag{4.2.229}$$

A H-atom gerjesztett állapotainak kvalitatív leírása. **A H-atom gerjesztett állapotaiban az impulzusmomentum, ill. annak z-irányú vetülete, $\hbar m$ lehet nullától különböző, ha nem s-állapotban van az elektron.** Ilyenkor az elektron valószínűségi áramsűrűségének j_r és j_θ komponense változatlanul eltűnik,

$$j_r = j_\theta = 0, \tag{4.2.230}$$

de **a valószinűségi áramsűrűség j_φ komponense lehet zérustól különböző:**

$$j_\varphi = \frac{i\hbar}{2\mu r\sin\theta}[\psi_{n\ell,m}\partial_\varphi\psi^*_{n\ell m} - \psi^*_{n\ell m}\partial_\varphi\psi_{n\ell,m}] \tag{4.2.231}$$

[48] Legfeljebb a normálási tényezőt választhatjuk komplexnek, de ennek nincsen helyfüggése, s így nem befolyásolja a valószínűségi áramsűrűség eltűnését.

Tudjuk, hogy a stacionárius állapotok hullámfüggvényei φ-től $e^{im\varphi}$ alakban függnek, ezért

$$j_\varphi = \frac{m\hbar}{\mu r \sin\theta}|\psi_{n\ell,m}|^2, \tag{4.2.232}$$

ami tényleg nem azonosan nulla. **Ha tehát $m \neq 0$, azaz az elektron nincsen s-állapotban, akkor az állapot olyan, mintha a z-tengelyre merőleges síkokban elemi köráramok folynának. Ez egyrészt magyarázza, hogy miért van a pályaimpulzusmomentumnak ilyenkor nullától különböző vetülete, másrészt arra lehet belőle következtetni, hogy a H-atomnak az elektron pályaimpulzusmomentumából származó mágneses dipólmomentuma van.**

Csakugyan, az elektrodinamika értelmében az elemi $di = j_\varphi\ rd\theta\ dr$ köráramok az általuk körülfolyt $A = \pi r^2 \sin^2\theta$ felülettel arányos

$$dM_z = -\frac{e}{c}A\ di = -\frac{e}{c}dr\ rd\theta\ j_\varphi\ \pi r^2 \sin^2\theta \tag{4.2.233}$$

járulékot adnak a mágneses momentumhoz. Ha ezeket a járulékokat az összes elemi köráramra felösszegezzük, akkor megkapjuk a teljes mágneses momentumot:

$$\begin{aligned} M_z &= -\frac{em\hbar}{2\mu c}\int_0^\infty dr\ r2\pi \int_0^\pi d\theta\ \sin\theta|\psi_{n\ell,m}|^2 \\ &= -\frac{em\hbar}{2\mu c}\int dV|\psi_{n\ell,m}|^2 = -\frac{em\hbar}{2\mu c} \equiv -m\mu_B \end{aligned} \tag{4.2.234}$$

ahol kihasználtuk, hogy $|\psi_{n\ell,m}|^2$ nem függ φ-től és ezért a hullámfüggvény normálási integrálja jelent meg az egyenlet jobb oldalán. Végül bevezettük a

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2\mu c} \tag{4.2.235}$$

Bohr-magnetont. Az is látszik innen, hogy a H-atom pályamozgásból származó mágneses momentuma arányos az elektron pályaimpulzusmomentuma $z-$irányú vetületének a várható értékével: $\ell_z = m\hbar$ miatt:

$$M_z = -\frac{e}{2\mu c}\ell_z. \tag{4.2.236}$$

A pályaimpulzusmomentum és z-irányú vetületének értéke, azaz az (ℓ, m) kvantumszámok azt határozzák meg, hogy hogyan viselkedik a hullámfüggvény a koordinátarendszernek az atom tömegközéppontja körüli elforgatásakor. Az ezt leíró $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ gömbfelületi függvények az elektron megtalálási valószínűségének jellegzetes irányfüggést kölcsönöznek. Az elektron megtalálási valószínűsége a TKP-tól adott r távolságban arányos $|Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)|^2$-tel, és ez a tényező határozza meg az irányfüggést. Példaként megadjuk a

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta\ d\theta|Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)|^2 = 1 \tag{4.2.237}$$

normálási feltételre normált gömfelületi függvények közül az s-, p- és d-állapotokat

jellemzők explicit alakját:

$$
\begin{aligned}
Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\
Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \quad Y_{1,\pm1} = \pm\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\ e^{\pm i\varphi}, \\
Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1), \quad Y_{2,\pm1} = \pm\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta\ e^{\pm i\varphi}, \\
Y_{2,\pm2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\ e^{\pm 2i\varphi},
\end{aligned}
\tag{4.2.238}
$$

A p-, d-, stb. állapotokban a megtalálási valószínűség irányfüggése ugyanolyan, mint rendre az elektromos dipól-, kvadrupól-, stb. antenna iránykarakterisztikája. Ennek köszönhető, hogy a gerjesztett állapotú H-atomnak különböző forgási szimmetriákat mutató alakja lehet, nem csak gömbalakja. Hasonló okokra vezethető vissza az atomok formagazdagsága, ami aztán a molekulák és az egész anyagi világ **formagazdagságát** eredményezi.

4.2.13. Részecske szóródása centrális potenciálon. Szórási amplitúdó és hatáskeresztmetszet

Szóráskísérlet és szórási hatáskeresztmetszet. Nagyon sokszor egy fizikai rendszerről úgy szerzünk ismeretet, hogy szóráskísérletet végzünk. A vizsgált fizikai rendszert, mint **céltárgyat,** idegen szóval **targetet** valamilyen részecskékkel bombázzuk és azt figyeljük, hogy ezek részecskék hogyan viselkednek a céltárggyal történő kölcsönhatás után. Már a klasszikus fizikában egy részecske (pontszerűnek tekinthető test) megfigyelése is tulajdonképpen szóráskísérlet, amikor azt vizsgáljuk, hogy a részecskére bocsátott fény (elektromágneses sugárzás) hogyan szóródik a részecskén. Az atomi és szubatomi méretű fizikai rendszerek vizsgálatának pedig az egyik legjelentősebb vizsgálati módszere, hogy a vizsgált rendszeren másik részecskét vagy elektromágneses sugárzást szóratunk.

A szóráskísérlet lényege, hogy egy részecskeforrás (gyorsító) adott impulzusú, ill. v_{be} sebességű részecskékből álló **részecskenyalábot** állít elő a céltárgytól nagy L távolságban. Általában feltesszük, hogy a nyaláb F keresztemetszetének lineáris méretei sokkal kisebbek, mint a részecskeforrás és a céltárgy közti távolság, $\sqrt{F} \ll L$ és ugyanakkor sokkal nagyobbak, mint a kibocsátott részecskék de Broglie-féle $\lambda_{\mathrm{be}} = \frac{h}{mv_{\mathrm{be}}}$ hullámhossza, $\sqrt{F} \gg \lambda_{\mathrm{be}}$, és sokkal nagyobbak, mint a céltárgy nyaláb keresztmetszetére merőleges vetületének F' területe lineáris méretei, $F \gg F'$. A nyaláb részecskéi kölcsönhatnak a céltárggyal, egy részük változatlanul továbbhalad, más részük irányt változtat. A céltárgytól $R \gg \sqrt{F}$ távolságban, tetszőleges irányokban

detektort helyezünk el és megfigyeljük, hogy mennyi részecske szóródik időegység alatt a detektorba.

A szórás jellemzésére bevezetjük a differenciális és a totális szórási hatáskeresztmetszet fogalmát. A továbbiakban rugalmas szórásról fogunk csak beszélni. A targetet rögzítettnek tekintjük és egy centrális potenciállal modellezzük. A koordinátarendszerünk origóját a potenciál centrumába helyezzük. Legyen a nyaláb hengerszimmetrikus és legyen a nyaláb tengelye a z-tengely. A szórt részecskék detektálására helyezzünk el **részecskedetektort** a $(\theta,\ \varphi)$ gömbi polárszögekkel jellemzett irányban. Jelölje $d\Omega = \sin\theta\ d\theta\ d\varphi$ azt a térszöget, amilyen térszög alatt a detektor infinitezimális méretű ablaka látszik a potenciál centrumából nézve. A detektort olyan nagy r távolságra (és irányban) helyezzük el, hogy $|r\sin\theta\cos\varphi|,\ |r\sin\theta\sin\varphi| \gg \sqrt{F}$ legyen. Az előreszórás mérése problematikus lehet, de ezzel a nehézséggel most nem foglalkozunk. A bejövő részecskenyaláb részecskéi v_{be} nagyságú, z-irányú sebességgel rendelkeznek, a hullámfüggvényük, $\psi_{\mathrm{be}} = Ae^{ikz}$ síkhullám, ahol $v_{\mathrm{be}} = \hbar k/m$, m a bombázó részecskék tehetetlen tömege. A normálási tényezőt válasszuk úgy, hogy a bejövḦ o részecskék valószínűségi áramsűrűségének nagysága

$$j_{\mathrm{be}} = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 = v_{\mathrm{be}}|A|^2 = v_{\mathrm{be}}n_{\mathrm{be}} \tag{4.2.239}$$

legyen, ahol n_{be} a bejövő részecskenyalábban a részecskék térfogati sűrűsége (a nyaláb egységnyi térfogatában található részecskék száma). Utóbbiról az egyszerűség kedvéért feltesszük, hogy időben és térben állandó a nyaláb belsejében. Választásunk annak felel meg, hogy a nyaláb V térfogatára a bejövőrészecskék hullámfüggvénye

$$\int_V dV|\psi_{\mathrm{be}}|^2 = n_{\mathrm{be}}V \tag{4.2.240}$$

feltétellel van normálva, vagyis a ψ_{be} hullámfüggvény abszolut értékének négyezetét a homogén nyaláb V térfogatára integrálva megkapjuk a nyaláb V térfogatában található részecskék számát. A nyaláb F merőleges keresztmetszetén dt idő alatt belépő részecskék száma

$$dN_{\mathrm{be}} = Fv_{\mathrm{be}}\ dt\ n_{\mathrm{be}} = Fj_{\mathrm{be}}dt \tag{4.2.241}$$

A valószínűségi áramsűrűség tehát megadja a nyaláb egységnyi keresztmetszetén időegység alatt belépő részecskék számát.

Ha betartjuk a kísérleti elrendezés geomatriai méretére vonatkozó, fentebb részletezett feltételeket, akkor a detektor csak a szóródott részecskéket érzékeli, azokat nem, amelyek szóródás nélkül haladnak tovább az eredeti irányban. A dt idő alatt az r sugarú gömbfelületnek a detektor ablaka által lefedett $r^2d\Omega$ felületén

$$dN_{\mathrm{s}z} = r^2d\Omega j_{\mathrm{s}z}dt \tag{4.2.242}$$

számú szórt részecske lép át a gömbfelületre merőlegesen. Itt $j_{\mathrm{s}z}$ a szórt részecskék valószínűségi áramsűrűségének a radiális komponense, a radiális irányra merőleges

egységfelületen időegység alatt átlépő részecskék száma. A szórást a $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ differenciális szórási hatáskeresztemtszettel jellemezzük, amelyet az időegység alatt $d\Omega$ térszögbe szórt részecskék $r^2 j_{\mathrm{sz}} d\Omega$ száma és az időegység alatt a nyaláb egységfelületén belépő részecskék j_{be} számának arányával definiálunk:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{r^2 j_{\mathrm{sz}} d\Omega}{j_{\mathrm{be}}}, \tag{4.2.243}$$

ahol a definíció során felhasználtuk, hogy az egyenlőség jobb oldala arányos a $d\Omega$ térszöggel. Innen azt kapjuk, hogy

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r^2 j_{\mathrm{sz}}}{j_{\mathrm{be}}}. \tag{4.2.244}$$

Az időegység alatt 4π térszögbe szórt részecskék teljes számát viszonyítva a bejövő részecskék valószínűségi áramsűrűségéhez, megkapjuk a totális szórási hatáskeresztmetszetet:

$$\sigma = \frac{\int_{4\pi} r^2 j_{\mathrm{sz}} d\Omega}{j_{\mathrm{be}}} = \int_{4\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \tag{4.2.245}$$

Ezt elvileg egy olyan detektor mérné, amelyik adott sugáron 4π térszögban körülveszi a targetet és nem érzékeli hátrairányban a még nem szórt, ill. előre irányban a szórás nélkül tovahaladó részecskéket.

Ha klasszikus, pontszerű golyócskák szóródnának egy klasszikus fizikai targeten, amellyel csak akkor hatnak kölcsön, ha érintkezésbe lépnek vele, akkor a szórt golyócskák teljes száma megegyezne azon golyócskák számával, amelyek beleütköznek a targetbe. Időegység alatt $F' v_{\mathrm{be}} n_{\mathrm{be}} = F' j_{\mathrm{be}}$ számú golyócska ütközik a targetbe, ahol F' a klasszikus fizikai target nyalábirányra merőleges vetületének területe. Ezért ekkor a teljes szórási hatáskeresztmetszet

$$\sigma = \frac{F' j_{\mathrm{be}}}{j_{\mathrm{be}}} = F', \tag{4.2.246}$$

azaz a targetnek a nyalábirányra merőleges geometriai keresztmetszete. Természetesen ilyen közvetlen geometriai jelentés már akkor sem adható a hatáskeresztmetszetnek, ha a részecskék és a target kölcsönhatásához nem szükséges a közvetlen érintkezés. Még kevésbé lehet ilyen geometriai jelentést tulajdonítani a hatáskeresztmetszetnek, ha a bombázó részecskék és a target is kvantummechanikai objektumok.

A totális hatáskeresztmetszet terület dimenziójú fizikai mennyiség. Egysége 1 barn= 10^{-24} cm^2.

Az alábbiakban megmutatjuk, hogyan lehet kiszámítani a kvantummechanika eszközeivel a differenciális szórási hatáskeresztmetszetet. Csak azzal az esettel fogunk foglalkozni, amikor sem a bombázó részecskék, sem a target nem gerjesztődik a szórási folyamatban, vagyis amikor a szórás folyamat úgynevezett rugalmas szórás.

A szórási amplitudó és a differenciális szórási hatáskeresztmetszet. **Tegyük fel, hogy a részecske olyan potenciálban mozog, amely a térbeli végtelenben eltűnik és a részecske E energiája nem negatív, $E \geq 0$, akkor a Schrödinger-egyenlet stacionárius megoldásait szórási állapotoknak nevezzük.** Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy a $V(r)$ potenciál centrális, azaz csak az r radiális koordinátától függ, ami a potenciál centrumától mért távolság. Ekkor a stacionárius Schrödinger-egyenletet célszerű ismét gömbi polárkoordinátás alakban felírni:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hat{\ell}^2}{2mr^2}+V(r)\right]\psi(r,\theta,\varphi)=E\psi(r,\theta,\varphi). \tag{4.2.247}$$

Ha bevezetjük a $k=\sqrt{2mE}/\hbar$ hullámszámot, akkor az egyenletet átírhatjuk

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi(r,\theta,\varphi)}{\partial r}\right)+\left[k^2-\frac{\hat{\ell}^2}{\hbar^2r^2}-\frac{2m}{\hbar^2}V(r)\right]\psi(r,\theta,\varphi)=0 \tag{4.2.248}$$

alakba. Ha a részecskenyaláb hengerszimmetrikus, akkor a hullámfüggvény nem függhet a φ szögtől, tehát ekkor $\psi(r,\theta)$. Ezt a továbbiakban feltételezzük az egyszerűség kedvéért.

Az egyenlet megoldását megfelelő **határfeltétellel** kell keresni, amelyik illeszkedik a szóráskísérlet feltételeihez. Ha a bejövő részecske hullámfüggvényét az e^{ikz} síkhullámmal közelítjük, ahol $\hbar k = mv_{\mathrm{be}}$, a szórt hullámot meg a ψ_{sz} hullámfüggvény írja le a szórócentrumtól nagy r távolságban, akkor a stacionárius hullámfüggvénynek a potenciáltól nagy távolságban

$$\psi(r,\theta)\sim e^{ikz}+\psi_{\mathrm{sz}}(r,\theta) \tag{4.2.249}$$

alakúnak kell lennie. Mi több, a szórt hullám csak kifutó gömbhullámokat tartalmazhat,

$$\psi_{\mathrm{sz}}(r,\theta)\sim f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}, \tag{4.2.250}$$

ahol az $f(\theta)$ szögfüggő szorzótényezőt **szórási amplitudónak** nevezzük. **A szórási amplitudót tehát a stacionárius Schrödinger-egyenlet megoldásának aszimptotikus alakjából tudjuk kiolvasni.**

Mielőtt rátérnénk a stacionárius Schrödinger-egyenlet ilyen határfeltételt kielégítő megoldásának megkeresésére, megmutatjuk, hogy **a szórási amplitudó, amelyet a stacionárius Schrödinger-egyenlet megoldásának aszimptotikus alakjából olvasunk ki, meghatározza a differenciális szórási hatáskeresztmetszetet:**

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=|f(\theta)|^2. \tag{4.2.251}$$

Csakugyan, a szórt hullám valószínűségi áramsűrűségvektorának radiális komponense (korábbi jelölésünkben $j_{\mathrm{s}z}$) az aszimptotikus tartományban:

$$\begin{aligned} j_{\mathrm{s}z}(r,\theta) &\sim \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_{\mathrm{s}z}\frac{\partial}{\partial r}\psi^\star_{\mathrm{s}z} - \psi^\star_{\mathrm{s}z}\frac{\partial}{\partial r}\psi_{\mathrm{s}z}\right) \\ &= \frac{i\hbar}{2m}\left[\psi_{\mathrm{s}z}\left(-ik-\frac{1}{r}\right)\psi^\star_{\mathrm{s}z} - \psi^\star_{\mathrm{s}z}\left(ik-\frac{1}{r}\right)\psi_{\mathrm{s}z}\right] \\ &= \frac{\hbar k}{m}|\psi_{\mathrm{s}z}|^2 = \frac{\hbar k}{mr^2}|f(\theta)|^2, \end{aligned} \tag{4.2.252}$$

ahol felhasználtuk, hogy

$$\frac{\partial}{\partial r}\psi_{\mathrm{s}z} = \left(ik-\frac{1}{r}\right)\psi_{\mathrm{s}z}. \tag{4.2.253}$$

A differenciális szórási hatáskeresztmetszet tehát

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = \frac{r^2 j_{\mathrm{s}z}}{j_{\mathrm{be}}} = |f(\theta)|^2. \tag{4.2.254}$$

Ezt akartuk belátni.

Centrális potenciálban mozgó részecskére és szabad részecskére vonatkozó radiális Schrödinger-egyenlet megoldása.* A (4.2.248) egyenletben szereplő Hamilton-operátor felcserélhető a pályaimpulzusmomentum négyzetének $\hat{\boldsymbol{\ell}}^2$ operátorával. Keressük ezért az egyenlet

$$\psi_{k,\ell,m}(r,\theta,\varphi) = R_{k,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) \tag{4.2.255}$$

alakú megoldásait, amelyek pályaimpulzusmomentum sajátállapotok is egyúttal. A radiális hullámfüggvényre ekkor a

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{k,\ell}(r)}{dr}\right) + \left[k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2}V(r)\right]R_{k,\ell}(r) = 0 \tag{4.2.256}$$

radiális Schrödinger-egyenletet kapjuk. Szabad mozgás esetén a (4.2.248) és a (4.2.256) egyenletben a potenciált zérusnak kell vegyük. A radiális egyenlet (4.2.256) alakja világosan mutatja, hogy a radiális hullámfüggvényt a k hullámszám (azaz az E energia) és az ℓ pályaimpulzusmomentum jellemzi.

A kinetikus energia (pontosabban a radiális impulzus) operátorának önadjungáltságát az biztosítja, hogy a $\chi_{k,\ell}(r) = rR_{k,\ell}(r)$ függvény az origóban eltűnik, $\chi_{k,\ell}(0) = 0$.

A nagy $r \to \infty$ távolságokon megvizsgálhatjuk a radiális hullámfüggvény aszimptotikus viselkedését. Ennek a

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)R_{k,\ell}(r) \sim -k^2 R_{k,\ell}(r) \tag{4.2.257}$$

egyenletet kell kielégítenie. Világos, hogy ennek az egyenletnek két független megoldása van,

$$R^{[ki]}(r) \sim \frac{e^{ikr}}{r}, \quad R^{[be]} \sim \frac{e^{-ikr}}{r}, \tag{4.2.258}$$

amelyek rendre a potenciál centrumából kifutó, ill. oda befutó gömbhullámot írnak le, ha megszorozzuk őket a stacionárius állapot időfüggését meghatározó $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ fázistényezővel. A pozitív energiás stacionárius állapotok $\psi_{k,\ell,m}(r,\theta,\varphi)$ hullámfüggvénye tehát az aszimptotikus $r \to \infty$ térbeli tartományokban általában egy kifutó és egy befutó gömbhullám lineáris kombinációja kell legyen:

$$R_{k,\ell}(r) \sim A_{k,\ell}\frac{e^{ikr}}{r} + B_{k,\ell}\frac{e^{-ikr}}{r} \sim \frac{\chi_{k,\ell}(r)}{r}. \tag{4.2.259}$$

Az $A_{k,\ell}$ és $B_{k,\ell}$ lineárkombinációs együtthatókat a

$$\int_0^\infty r^2 dr R^\star_{k',\ell}(r) R_{k,\ell}(r) = 2\pi\delta(k'-k) \tag{4.2.260}$$

normálási feltétel és az $[rR_{k,\ell}(r)]_{r=0} = 0$ határfeltétel rögzíti, de meglehetősen implicit módon. Az ortonormáltsági feltételbe és a origóban kirótt határfeltételbe az egzakt megoldást kell ugyanis behelyettesíteni.

1. Vizsgáljuk először *a szabad részecske mozgását.* Az $\ell = 0$ esetben a radiális hullámfüggvényre vonatkozó (4.2.257) egyenlet nemcsak az aszimptotikus tartományban áll fenn, hanem egzaktul igaz az $r \in [0, \infty)$ intervallumon. Az $R_{k,0}(r)$ megoldás tehát az egész $r \in [0, \infty)$ intervallumon (4.2.259) alakú. A $\chi_{k,0}(0) = 0$ határfeltételnek elegettevő megoldásra tehát

$$A_{k,0} + B_{k,0} = 0, \quad B_{k,0} = -A_{k,0}, \tag{4.2.261}$$

úgyhogy

$$R_{k,0} = \frac{A_{k,0}}{r}(e^{ikr} - e^{-ikr}) = \frac{2iA_{k,0}}{r}\sin(kr). \tag{4.2.262}$$

Az (4.2.260) ortonormáltsági feltételből $|A_{k,0}|^2 = 1$, ami megengedi az $A_{k,0} = -i$ választást; ekkor

$$\psi_{k,0,0}(r,\theta,\varphi) = \frac{2}{r}\sin(kr)Y_{0,0}. \tag{4.2.263}$$

Szabad részecske esetén az $\ell > 0$ esetben a radiális Schrödinger-egyenlet

$$-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}R_{k,\ell}\right) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R_{k,\ell} = k^2 R_{k,\ell} \tag{4.2.264}$$

alakot ölt. Keressük ennek a megoldását $R_{k,\ell}(r) = C_{k,\ell} r^\ell \phi_{k,\ell}(r)$ alakban, ahol $C_{k,\ell}$ normálási együttható. A már tárgyalt $\ell = 0$ speciális esetben: $R_{k,0}(r) = \phi_{k,0}(r) = \frac{2}{r}\sin kr$. Ekkor $\ell > 0$ esetén behelyettesítéssel a

$$\phi''_{k,\ell} + \frac{2(\ell+1)}{r}\phi'_{k,\ell} + k^2\phi_{k,\ell} = 0 \tag{4.2.265}$$

differenciálegyenletet kapjuk a $\phi_{k,\ell}(r)$ függvényekre. Vegyük észre, hogy ha deriváljuk a (4.2.265) egyenlet mindkét oldalát r szerint,

$$\phi'''_{k,\ell} + \frac{2(\ell+1)}{r}\phi''_{k,\ell} + \left[k^2 - \frac{2(\ell+1)}{r^2}\right]\phi'_{k,\ell} = 0, \tag{4.2.266}$$

majd $\phi'_{k,\ell}(r) = r\chi(r)$ helyettesítéssel élünk, akkor a $\chi(r)$ függvényre kapott

$$\chi'' + \frac{2(\ell+2)}{r}\chi' + k^2\chi = 0 \tag{4.2.267}$$

egyenlet pontosan azonos a (4.2.265) egyenlettel, ha abban ℓ-et $(\ell+1)$-gyel helyettesítjük. Mondhatjuk tehát, hogy $\chi(r) = \phi_{k,\ell+1}(r)$, ami azt jelenti, hogy rekurziós képletet találtunk a $\phi_{k,\ell}(r)$ függvények meghatározására:

$$\phi_{k,\ell+1}(r) = \frac{1}{r}\frac{d}{dr}\phi_{k,\ell}(r). \tag{4.2.268}$$

Ennek megoldása:

$$\phi_{k,\ell}(r) = \left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^\ell \phi_{k,0}(r) = \left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^\ell \frac{2\sin(kr)}{r}. \tag{4.2.269}$$

Az $R_{k,\ell}(r)$ függvényekre vonatkozó ortonormáltsági feltételből a normálási együtthatókra $|C_{k,\ell}|^2 = k^{-2\ell}$ adódik, ami megengedi a $C_{k,\ell} = (-1)^\ell/k^\ell$ választást. Ekkor a szabad mozgásra vonatkozó, ℓ impulzusmomentumhoz tartozó radiális hullámfüggvény alakja

$$R_{k,\ell}(r) = (-1)^\ell \frac{2r^\ell}{k^\ell}\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^\ell \frac{\sin(kr)}{r} = 2k(-1)^\ell (kr)^\ell \left(\frac{1}{kr}\frac{d}{d(kr)}\right)^\ell \frac{\sin(kr)}{kr} \equiv 2kj_\ell(kr), \tag{4.2.270}$$

ahol $j_\ell(u)$ $(0 \leq u)$ az úgynevezett ℓ-edrendű szférikus Bessel-függvények.

A fentieket összegezve azt mondhatjuk, hogy gömbi polárkoordinátákban a szabad mozgás stacionárius Schrödinger-egyenletének álló gömbhullámokat leíró $\psi_(k,\ell,m)(r,\theta,\varphi)$ megoldásai vannak, amelyek az $E = \hbar^2k^2/2m$ energiasajátértékhez és a pályaimpulzusmomentum négyzetének, ill. vetületének rendre $\hbar^2\ell(\ell+1)$, ill. $\hbar m$ sajátértékéhez tartozó sajátállapotok. Ezek olyan

$$\psi_(k,\ell,m)(r,\theta,\varphi) = 2kj_\ell(kr)Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) \tag{4.2.271}$$

állapotok, amelyekben a pályaimpulzusmomentum négyzetének és z-irányú vetületének vannak jól definiált értékei, viszont amelyekben a részecske impulzusa nem jól definiált, azaz ezek nem impulzus sajátállapotok.

Vizsgáljuk még meg, hogy hogyan viselkednek a szabad mozgást leíró $R_{k,\ell}(r)$ radiális hullámfüggvények az $r \to \infty$ aszimptotikus tartományban. Az aszimtotikus viselkedést az r növekedtével leglassabban csökkenő tag határozza meg, amelyet akkor kapunk meg, ha a radiális hullámfüggvény implicit kifejezésében kijelölt deriválások mind a szöggfüggvény hatványára hatnak,

$$R_{k,\ell}(r) \overset{r\to\infty}{\sim} (-1)^\ell \frac{2r^\ell}{k^\ell}\frac{1}{r^\ell r}\frac{d^\ell}{dr^\ell}\sin(kr). \tag{4.2.272}$$

Felhasználva, hogy minden egyes deriválás a szinusz-függvény $(-k)$-val történő szorzását és argumentumának $(-\pi/2)$-vel történő eltolását jelenti, azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} R_{k,\ell} &\overset{r\to\infty}{\sim} (-1)^\ell \frac{2}{k^\ell r}(-k)^\ell \sin(kr - \ell\frac{\pi}{2}) \\ &\overset{r\to\infty}{\sim} \frac{2\sin(kr-\ell\frac{\pi}{2})}{r} \end{aligned} \tag{4.2.273}$$

a szabad mozgás radiális hullámfüggvényeinek aszimptotikus alakja. Ahogy az aszimptotikus tartományban érvényes (4.2.257) egyenlet általános megoldásától várjuk, a kapott (4.2.273) aszimptotikus alak kifutó és befutó gömbhullámok lineáris kombinációja:

$$\begin{aligned} R_{k,\ell} &\overset{r\to\infty}{\sim} \frac{2\sin(kr-\ell\frac{\pi}{2})}{r} = \frac{1}{i}\left[\frac{e^{i(kr-\ell\frac{\pi}{2})}}{r} - \frac{e^{-i(kr-\ell\frac{\pi}{2})}}{r}\right] \\ &\overset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{i}\left[(-i)^\ell\frac{e^{ikr}}{r} - i^\ell\frac{e^{-ikr}}{r}\right] \end{aligned} \tag{4.2.274}$$

+

Szabad részecske impulzus-sajátállapotát leíró hullámfüggvényt kifejthetünk adott pályaimpulzusmomentumú sajátállapotok ortonormált teljes rendszere szerint **Ezt a síkhullám parciális hullámok szerinti kifejtésének nevezzük.** Mozogjon a részecske a z-tengely irányában $\hbar k$ nagyságú impulzussal, azaz legyen a részecske a $\hat{\vec{p}}$ impulzus-operátor $\vec{p} = (0,0,\hbar k)$ sajátértékkel jellemzett sajátállapotában (a Descartes-komponenseket tüntettük fel). Ekkor a részecske hullámfüggvénye (a szabad részecske Descartes-koordinátákban felírt stacionárius Schrödinger-egyenletének megoldása) e^{ikz}. (A hullámfüggvényt úgy normáltuk, hogy z-irányú valószínűségi áramsűrűsége $\hbar k/m$ legyen.) Fejtsük ezt ki a szabad részecske $\psi_{k,\ell,m}(r,\theta,\varphi) = R_{k,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$

gömhullám megoldásai szerint. Mivel $e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta}$ a z-tengely körüli elforgatásokkal szemben szimmetrikus, azaz független a φ szögtől, azért a kifejtésben csak a φ szögtől független

$$\psi_{k,\ell,0}(r,\theta) = R_{k,\ell}(r)Y_{\ell,0}, \quad Y_{\ell,0} = i^\ell\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}P_\ell(\cos\theta) \tag{4.2.275}$$

függvények szerepelhetnek:

$$e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_\ell R_{k,\ell}(r)Y_{\ell,0}. \tag{4.2.276}$$

Felhasználva a gömbfüggvények ortonormáltságát, az a_ℓ sorfejtési együtthatók meghatározhatók, és

$$e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty}(-i)^\ell(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\left(\frac{r}{k}\right)^\ell\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^\ell\frac{\sin(kr)}{kr} \tag{4.2.277}$$

adódik. A síkhullám gömbhullámok szerinti kifejtésének aszimptotikus alakja $r\to\infty$ esetén

$$\begin{aligned} e^{ikz} &\overset{r\to\infty}{\sim} \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\frac{\sin(kr-\ell\frac{\pi}{2})}{kr} \\ &\sim \sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{i^\ell(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)}{2ikr}[(-i)^\ell e^{ikr} - i^\ell e^{-ikr}] \\ &\sim \sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{i^\ell(2\ell+1)(-i)^\ell P_\ell(\cos\theta)}{2ikr}[e^{ikr} + (-1)^{\ell+1}e^{-ikr}]. \end{aligned} \tag{4.2.278}$$

Szemléletesen a bejövő síkhullámnka adott pályaimpulzusmomentum **parciális hullámokra történő felbontásával** a befutó síkhullámot $\ell_z = \sqrt{\hbar^2\ell(\ell+1)}$ pályamomentumú, azaz $b = \frac{\ell_z}{k\hbar} = \frac{\sqrt{\ell(\ell+1)}}{k}$ ütközési paraméterű komponensekre bontottuk. A szórási probléma megoldásként azt fogjuk látni, hogy ezek a parciális hullámok hogyan szóródnak a centrális potenciálon.

2. Vizsgáljuk most *a centrális potenciálban mozgó részecske esetén a radiális hullámegyenlet aszimptotikus alakját.* Ha a centrális potenciál az aszimptotikus $r\to\infty$ tartományban elég gyorsan eltűnik, akkor most is a (4.2.257) egyenlet írja le az aszimptotikus viselkedést. Ez azt jelenti, hogy a radiális hullámfüggvény most is befutó és kifutó gömbhullámok lineáris kombinációja. Behelyettesítéssel könnyű belátni, hogy a (4.2.257) egyenletnek megoldása az

$$R_{k,\ell} \overset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{i}\left[(-i)^\ell\frac{e^{ikr+i\delta_\ell(k)}}{r} - i^\ell\frac{e^{-ikr-i\delta_\ell(k)}}{r}\right] = \frac{2\sin[kr-\ell\frac{\pi}{2}+\delta_\ell(k)]}{r} \tag{4.2.279}$$

aszimptotikus alak. Itt a $\delta_\ell(k)$ energiafüggő fáziseltolódásokat az egzakt

$$-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}R_{k,\ell}\right) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R_{k,\ell} + \frac{2m}{\hbar^2}V(r)R_{k,\ell} = k^2R_{k,\ell} \tag{4.2.280}$$

radiális Schrödinger-egyenletnek az $[rR_{k,\ell}(r)]_{r=0} = 0$ határfeltételt kielégítő megoldásából kell kiolvasni, meghatározva az egzakt $R_{k,\ell}(r)$ radiális hullámfüggvény aszimptotikus alakját és összehasonlítva azt az (4.2.279) alakkal. A különböző pályaimpulzusmomentumú hullámok fáziseltolódását a potenciál alakja határozza meg.

Parciális hullámokra bontás. Az előzékben megkerestük a (4.2.248) stacionárius Schrödinger-egyenlet olyan $\psi_{k,\ell,m}$ megoldásait, amelyek egyúttal pályaimpulzusmomentum sajátfüggvények. Ezeket a megoldásokat *parciális hullámoknak* is szokás nevezni. A következő feladatunk, hogy megkeressük a (4.2.248) stacionárius Schrödinger-egyenlet azon megoldását, amelyik kielégíti a szórás-kísérlethez illeszkedő határfeltételeket. Ezek a (4.2.249) aszimptotikus alak megkövetelésében fogalmazhatók meg matematikailag. A (4.2.248) egyenlet általános megoldása parciális hullámok lineáris kombinációja:

$$\psi_{k,\ell}(r,\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \tilde{A}_{k,\ell} Y_{\ell,0}(\theta,\varphi) R_{k,\ell}(r) = \sum_{\ell=0}^{\infty} A_{k,\ell} P_\ell(\cos\theta) R_{k,\ell}(r) \tag{4.2.281}$$

Ezt behelyettesítve a (4.2.248) stacionárius Schrödinger-egyenletbe és felhasználva a gömbfüggvények

$$\int_{(4\pi)} d\Omega Y_{\ell',0}(\theta,\varphi) Y_{\ell,0}(\theta,\varphi) = \delta_{\ell',\ell} \tag{4.2.282}$$

ortogonalitását, visszakapjuk az egyes parciális hullámok $R_{k,\ell}(r)$ radiális hullámfüggvényeire a (4.2.256) radiális Schrödinger-egyenletet. Ennek megoldásáról tudjuk, hogy aszimptotikusan (4.2.279) alakú. Ugyanakkor a (4.2.248) egyenlet megoldásától megköveteljük, hogy aszimptotikusan (4.2.249) alakú legyen, azaz hogy az ψ_{sz} szórt hullám ne tartalmazzon befutó gömbhullám-komponenst. Ez azt jelenti, hogy a ψ megoldásban a befutó parciális hullámoknak pontosan olyan súllyal kell előfordulniuk, mint amilyennel azok a bejövő részecskét leíró síkhullámban vannak jelen. Ez a feltétel egyértelműen rögzíti a parciális hullámok szerinti kifejtésben szereplő $A_{k,\ell}$ együtthatókat. Explicit kifejezésüket behelyettesítve a szórt hullám aszimptotikus alakjába, leolvashatjuk az $f(\theta)$ szórási amplitudó kifejezését.

Az egyes radiális hullámok (4.2.279) aszimptotikus alakját felhasználva, a (4.2.248) egyenlet megoldásának aszimptotikus alakja

$$\psi(r,\theta) \sim \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{A_{k,\ell} P_\ell(\cos\theta)}{ir} e^{-i\delta_\ell} (-i)^\ell [e^{ikr+2i\delta_\ell} + (-1)^{\ell+1} e^{-ikr}]. \tag{4.2.283}$$

Ezt és a síkhullám (4.2.278) aszimptotikus alakját, a szórt hullám aszimptotikus alakjára

$$\begin{aligned}
\psi_{\mathrm{as}} \quad &\sim \quad \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{A_{k,\ell} P_\ell(\cos\theta)}{ir} e^{-i\delta_\ell} (-i)^\ell [e^{ikr+2i\delta_\ell} + (-1)^{\ell+1} e^{-ikr}] \\
&- \quad \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{i^\ell (2\ell+1) P_\ell(\cos\theta)}{2ikr} (-i)^\ell [e^{ikr} + (-1)^{\ell+1} e^{-ikr}] \\
&\sim \quad \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{P_\ell(\cos\theta)}{2ikr} (-i)^\ell \Big[[2kA_{k,\ell} e^{-i\delta_\ell} e^{ikr+2i\delta_\ell} - i^\ell (2\ell+1) e^{ikr}] \\
&\quad +(-1)^{\ell+1} [2kA_{k,\ell} e^{-i\delta_\ell} - i^\ell (2\ell+1)] e^{-ikr} \Big].
\end{aligned} \tag{4.2.284}$$

A szórt hullám (4.2.249) aszimptotikus alakjának megkövetelése egyenértékű avval, hogy a fenti egyenlet jobb oldalán a befutó gömbhullámok amplitudói tűnjenek el, azaz hogy a lineárkomobinációs együtthatókra

$$A_{k,\ell} = \frac{i^\ell (2\ell+1) e^{i\delta_\ell}}{2k} \tag{4.2.285}$$

álljon fenn. Ekkor a szórt hullám aszimptotikus alakja:

$$\begin{aligned}
\psi_{\rm as} &\sim \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{P_\ell(\cos\theta)}{2ikr}(-i)^\ell [2kA_{k,\ell} e^{-i\delta_\ell} e^{ikr+2i\delta_\ell} - i^\ell (2\ell+1) e^{ikr}] \\
&\sim \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{P_\ell(\cos\theta)}{2ikr}(-i)^\ell i^\ell (2\ell+1)[e^{2i\delta_\ell} - 1] e^{ikr} \\
&\sim f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r},
\end{aligned} \tag{4.2.286}$$

ahonnan kiolvashatjuk a szórási amplitudó kifejezését:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\left(e^{2i\delta_\ell} - 1\right) P_\ell(\cos\theta) \equiv \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1) f_\ell P_\ell(\cos\theta). \tag{4.2.287}$$

Ebben a fejezetben mindvégig felhasználtuk a bombázó részecske iránya körüli tengelyszimmetriát. Itt $\delta_\ell(k)$ pedig **a szórt kifutó gömbhullám fáziseltolódása** a potenciál centrumától távol, amelyet az egyes $R_{k,\ell}$ parciális hullámokra vonatkozó radiális Schrödinger-egyenlet megoldásának aszimptotikus alakjából kell kiolvasni. Az

$$f_\ell = \frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta_\ell} - 1\right) \tag{4.2.288}$$

mennyiségeket **parciális amplitudóknak** szokás nevezni. **A teljes szórási amplitudó az egyes parciális amplitudóknak a megfelelő Legendre-polinomokkal és a pályamomentum vetületének multiplicitásával súlyozott összege. A totális szórási hatáskeresztmetszet,**

$$\sigma = \int d\sigma = \int d\Omega |f(\theta)|^2 = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_\ell \tag{4.2.289}$$

a differenciális szórási hatáskeresztmetszetnek a teljes 4π térszögre vett integrálja, azaz az időegység alatt a 4π térszögbe szórt részecskék száma osztva a bejövő nyaláb valószínűségi áramsűrűségével, ahol

$$\sigma_\ell = 4\pi(2\ell+1)|f_\ell|^2 = \frac{4\pi}{k^2}(2\ell+1)\sin^2\delta_\ell(k). \tag{4.2.290}$$

Az integrális szórási hatáskeresztmetszet a σ_ℓ parciális hatáskeresztmetszetek összege.

Látjuk tehát, hogy az egyes parciális hullámok additív módon járulnak hozzá a totális hatáskeresztmetszethez. Ez első pillantásra meglepő lehet, hiszen a szórási

amplitudó maga is az egyes parciális hullámokra vonatkozó szórási amplitudók összege, s ezért a hatáskeresztmetszetben a különböző parciális amplitudók interferenciáját várhatnánk. Ilyen interferencia-tagok azonban csak a differenciális szórási hatáskeresztmetszetben lépnek fel, a totális (a térszögre kiintegrált) hatáskeresztmetszetben már nem, mert a különböző rendű Legendre-polinomok páronként ortogonálisak.

Az is figyelemre méltó, hogy ha a differenciális szórási hatáskeresztmetszetet adott energián valamelyik parciális hullám dominálja, azaz csak egyetlen ℓ-hez tartozó parciális hullám ad hozzá nem elhanyagolható járulékot, akkor a differenciális szórási hatáskeresztmetszet szögfüggése $d\sigma/d\Omega \sim P_\ell(\cos\theta)$ alapján a mért differenciális hatáskeresztmetszetből közvetlenül el lehet dönteni, hogy melyik parciális hullámról van szó.

Látjuk, hogy a rugalmas szórási hatáskeresztmetszet[49] alapvetően $\sigma \sim 1/k^2 \sim 1/E$ módon függ a bombázó részecske energiájától, azaz fordítottan arányos vele.

[49]Mivel potenciálszórást vizsgálunk, a totális szórási hatáskeresztmetszet egyúttal a rugalmas szórási hatáskeresztmetszet is, hiszen nincsen a rugalmas szóráson kívül más folyamat, ami bekövetkezhetne. A jelen jegyzet kereteit meghaladja azon szórási folyamatok tárgyalása, amikor a szórási folyamatban résztvevő részecskék maguk is gerjesztődhetnek, esetleg el is bomolhatnak részeikre a folyamat közben. Utóbbi esetben a rugalmas szórás hatáskeresztmetszete kisebb, mint a totális szórási hatáskeresztmetszet, amelyhez definíció szerint valamennyi lehetséges folyamat hozzájárul. A szórási folyamatok leírásával a kvantummechanika szóráselmélet nevű ága foglalkozik.

5. RÉSZECSKERENDSZEREK

A részecskerendszerek kvantummechanikája rendkívül gazdag és szerteágazó, mind a szóbajöhető fizikai rendszereket, mind pedig a rájuk vonatkozó Schrödinger-egyenlet megoldási módszereit illetően. A kvantummechanika általános érvényű elvei természetesen minden kvantummechanikai rendszerre egyaránt érvényesek. Ezekkel már az előző fejezetekben megismerkedtünk, és láttuk, hogyan jutnak érvényre a különböző egyrészecskés rendszerekben. Van azonban a kvantummechanikának egy olyan további elve, amelyik csak akkor kaphat szerepet, ha rendszerben legalább két darab, **azonos részecske** van. Ez a **részecskeazonosság elve.** Ebben a fejezetben erről az elvről és általános következményeiről beszélünk. Természetesen egy féléves bevezető kvantummechanika előadásnak még az sem lehet célja, hogy megismertesse a tisztelt Hallgatót a legfontosabb sokrészecske-rendszerekkel. Ezek szinte az egész fizikát felölelik. Lehetne említeni az atomokat, a molekulákat, a szilárdtesteket, de a szubatomi fizikában az atommagokat, a hadronokat és rengeteg, ezekkel kapcsolatos jelenséget. Itt csak néhány olyan példát próbálok kiragadni, és részletes tárgyalásuk nélkül mintegy felvillantani, amelyek nagy mértékben igazolják a kvantummechanika helyességét. Itt kell elmondani, hogy **jelenleg nem ismerünk olyan kísérleti tényeket, amelyeknek alapján kételkednünk kellene abban, hogy a kvantummechanika helyesen írja le a mikrovilág nem relativisztikus jelenségeit.**

A kvantummechanika érvényességi köre mégis korlátozott.

1. Egyrészt, az a tapasztalat, hogy amikor részecskék relativisztikus energiákon hatnak kölcsön, akkor **a részecskék megsemmisülhetnek, azaz sugárzássá alakulhatnak át, ill. új részecskék keletkezhetnek.** Ez nem fér bele a kvantummechanika keretei közé. Láttuk, hogy a kvantummechanikában feltesszük, hogy a hullámfüggvény normája időben állandó. Ez fejezi ki matematikailag azt a fizikai jelentést, hogy a részecskék számának egy (zárt) kvantummechanikai rendszeren belül meg kell maradnia. A kvantummechanika relativisztikus általánosítása nem bizonyult ellentmondásmentesen véghezvihetőnek. Az ilyen irányú próbálkozások azonban elvezettek a **kvantumtérelmélet** megszületéséhez, **amelyben sikerült a kvantummechanika és a speciális relativitás elmélete elveinek az ötvözése.** A kvantumtérelmélet alkalmas olyan folyamatok leírására, amelyekben részecskék keletkeznek, ill. semmisülnek meg, azaz sugárzódnak szét.

2. Más oldalról, az sem nyilvánvaló, hogy a kvantummechanika érvényes-e változatlan formában, vagy pedig általánosítható-e kézenfekvő módon arra az esetre, amikor gravitáció van jelen. Az általános relativitás elmélete értelmében a gravitáció abban nyilvánul meg, hogy a téridő görbült, nem lapos geometriájú. A kérdés tehát úgy fogalmazható át, hogy milyen a kvantumfizika görbült

téridőben. Mennyiben különbözik görbült téridőben a kvantumfizika attól, ami a nem görbült Minkowski-téridőben érvényes.

3. Végül pedig ott van a fizika egyik igazán mély kérdése, hogy a kvantumfizikai viselkedésű anyag hogyan hozza létre a tapasztalataink szerint nem kvantumos görbült téridőt. De másképp is kérdezhetünk: nem az a természetes, hogy a kvantumos anyag kvantált téridőt hoz létre, amely csak a csillagászati megfigyelési skálákon látszik klasszikus görbült téridőnek. Végső soron tehát a gravitáció is kvantált? Ezek, bizton állíthatom, korunk fizikájának legizgalmasabb kérdései.

5.1. Összetett rendszer

Tegyük fel, hogy a fizikai rendszer szabadsági fokainak száma s. Ez azt jelenti, hogy az állapotának egyértelmű megadásához szükséges és elegendő, egyidejűleg mérhető fizikai mennyiségek száma is s. Legyenek ezek a fizikai mennyiségek $\hat{F}_i$, $i = 1, 2, \ldots, s$, ekkor $[\hat{F}_i, \hat{F}_j] = 0$. A fizikai mennyiségeknek ezt a rendszerét a **fizikai mennyiségek teljes rendszerének** nevezzük. A rendszernek lehetséges mikroállapotai azok az $|F_1, F_2, \ldots, F_s\rangle$ állapotok, amelyek közös sajátvektorai a fizikai mennyiségek teljes rendszerében szereplő valamennyi operátornak:

$$\hat{F}_i|F_1, F_2, \ldots, F_s\rangle = F_i|F_1, F_2, \ldots, F_s\rangle. \tag{5.1.1}$$

A teljes Hilbert-tér az $|F_1, F_2, \ldots, F_s\rangle$ állapotoknak tetszőleges lineáris kombinációit is tartalmazza. Az s szabadsági fok ezek szerint azt jelenti, hogy van a rendszernek s darab független tulajdonsága, amelyeket rendre az s darab $\hat{F}_i$ mennyiségnek az F_i értékei jellemeznek.

A fizikai mennyiségek teljes rendszerét általában sokféleképpen meg lehet választani. Válasszuk most úgy, hogy az egyes tulajdonságok az egyedi szabasági fokokat jellemezzék: legyen a fizikai mennyiségek teljes rendszere az egyes részecskék Descartes-koordinátáinak a halmaza[50], amelyeket az egyszerűség kedvéért $\hat{x}_i$-vel ($i = 1, 2, \ldots, s$) jelölünk. Egy részecske esetén $s = 3$ és a teljes rendszer $\hat{x}_1 = \hat{x}$, $\hat{x}_2 = \hat{y}$, $\hat{x}_3 = \hat{z}$; N részecske esetén $s = 3N$ és $i \equiv (a, \alpha)$, ahol $a = 1, 2, \ldots, N$ a részecske-index, $\alpha = 1, 2, 3$ a Descartes-komponensek indexe.

Felmerülhet az a kérdés, hogy az s darab független koordinátával rendelkező rendszer Hilbert-terét meg lehet-e konstruálni olyan Hilbert-terekből, amelyek olyan – hipotetikus – rendszerek Hilbert-terei, amelyeket rendre csak az s darab koordináta egyike jellemez, azaz egyetlen szabadsági fokú hipotetikus rendszerek

[50] Ha a részecskéknek nemcsak térbeli, hanem belső szabadsági fokai is vannak, mint pl. a spin, akkor a koordinátákhoz hozzá kell venni pl. az egyes részecskék spinjének tetszőleges, rögzített irányú vetületét is. Az egyszerűség kedvéért most csak azt az esetet tárgyaljuk, amikor a részecskék spinje nulla és más belső szabadsági fokuk sincsen.

Hilbert-tereiből. Az i-edik szabadsági fokhoz tartozó $\mathcal{H}_i$ Hilbert-teret az $\hat{x}_i$ operátor sajátvektorai,

$$\hat{x}_i|x_i\rangle = x_i|x_i\rangle, \quad \langle x_i''|x_i'\rangle = \delta(x_i'' - x_i'), \quad \hat{1}_{\mathcal{H}_i} = \int dx_i|x_i\rangle\langle x_i| \tag{5.1.2}$$

feszítik ki. Ugyanakkor a teljes $\mathcal{H}$ Hilbert-teret olyan $|x_1, x_2, \ldots, x_s\rangle$ vektorok feszítik ki, amelyek valamennyi $\hat{x}_i$ operátornak közös sajátüggvényei:

$$\begin{aligned}
\hat{x}_i|x_1, x_2, \ldots, x_s\rangle &= x_i|x_1, x_2, \ldots, x_s\rangle, \\
\langle x_1'', x_2'', \ldots, x_s''|x_1', x_2', \ldots, x_s'\rangle &= \prod_{i=1}^{s} \delta_{x_i'', x_i'}, \\
\hat{1}_{\mathcal{H}} = (\prod_{i=1}^{s} \int dx_i)|x_1, x_2, \ldots, x_s\rangle\langle x_1, x_2, \ldots, x_s|.
\end{aligned} \tag{5.1.3}$$

Ilyen tulajdonságok akkor elégülnek ki, ha a teljes $\mathcal{H}$ Hilbert-tér az egyes $\mathcal{H}_i$ Hilbert-tereknek úgynevezett **tenzori szorzata:**

$$\mathcal{H} = \prod_{i=1}^{s} \otimes \mathcal{H}_i. \tag{5.1.4}$$

A tenzori szorzattér bázisvektorait formálisan

$$|x_1, x_2, \ldots, x_s\rangle = |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes \cdots |x_s\rangle \tag{5.1.5}$$

tenzori szorzatalakban képzelhetjük el. A tenzori szorzás $\otimes$ műveletéről feltesszük, hogy minden tényezőjében lineáris. A tenzori szorzatteret az ilyen, szorzatalakú vektorok, mint bázis által kifeszített lineáris vektortérként értelmezzük. Ha az egyes $\mathcal{H}_i$ Hilbert-terek rendre M_i dimenziósak (pl. az x_i lehetséges értékeinek számossága kontinuum végtelen), akkor a tenzori szorzattér $M_1 M_2 \cdots M_s$ dimenziós. A tenzori szorzattér tartalmaz a bázisvektorokhoz hasonló, szorzatalakú állapotokat, ún. **szeparálható állapotokat,** és a bázisvektorok tetszőleges lineáris kombinációi között találunk nem szeparálható, ún. **összefonódott állapotokat.** Bármely, eredetileg az egyik $\mathcal{H}_i$ Hilbert-téren értelmezett $\hat{o}_i$ operátor értelmezése kiterjeszthető a teljes $\mathcal{H}$ Hilbert-térre úgy, hogy a tetszőleges

$$|\psi\rangle = (\prod_{i=1}^{s} \int dx_i)\psi(x_1, x_2, \ldots, x_s)|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes \cdots \otimes |x_s\rangle \tag{5.1.6}$$

állapotvektorra a hatása:

$$\begin{aligned}
\hat{o}|\psi\rangle &= (\prod_{i=1}^{s} \int dx_i)\psi(x_1, x_2, \ldots, x_s)|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes \cdots \otimes |x_{i-1}\rangle \otimes (\hat{o}_i|x_i\rangle) \otimes |x_{i+1}\rangle \otimes \cdots \otimes |x_s\rangle \\
&= \left(\hat{1}_{\mathcal{H}_1} \otimes \hat{1}_{\mathcal{H}_2} \otimes \cdots \otimes \hat{1}_{\mathcal{H}_{i-1}} \otimes \hat{o}_i \otimes \hat{1}_{\mathcal{H}_{i+1}} \otimes \cdots \otimes \hat{1}_{\mathcal{H}_s}\right)|\psi\rangle,
\end{aligned} \tag{5.1.7}$$

azaz formálisan, mintha egység-operátorok és az $\hat{o}_i$ operátor szorzata lenne.

A tenzori szorzattérben a tetszőleges bázisvektorok skalárszorzatát

$$\langle x_1'', x_2'', \ldots, x_s''|x_1', x_2', \ldots, x_s'\rangle = \prod_{i=1}^{s} \langle x_i''|x_i'\rangle = \prod_{i=1}^{s} \delta(x_i'' - x_i') \tag{5.1.8}$$

alakban értelmezzük, tetszőleges

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &= (\prod_{i=1}^{s} \int dx_i)\phi(x_1, x_2, \ldots, x_s)|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes \cdots \otimes |x_s\rangle, \\ |\psi\rangle &= (\prod_{i=1}^{s} \int dx_i)\psi(x_1, x_2, \ldots, x_s)|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes \cdots \otimes |x_s\rangle, \end{aligned} \tag{5.1.9}$$

vektorok skaláris szorzatára pedig

$$\langle\phi|\psi\rangle = (\prod_{i=1}^{s} \int dx_i)\phi^\star(x_1, x_2, \ldots, x_s)\psi(x_1, x_2, \ldots, x_s) \tag{5.1.10}$$

adódik, ha továbbra is megköveteljük skaláris szorzat linearitását, ill. anti-linearitását, rendre a második, ill. az első tényezőjében. Összegezve, **az s szabadsági fokú rendszer Hilbert-tere tehát az egyes szabadsági fokok Hilbert-tereinek tenzori szorzata.**

Az egy-egy részecskéhez tartozó szabadsági fokokat együtt kezelve, a fentiek azt is jelentik, hogy az N **részecskés rendszer Hilbert-tere az egyes részecskék Hilbert-tereinek tenzori szorzata.** Az N-részecskés rendszer esetén a fentiek annyiban módosulnak, hogy a $\hat{\vec{r}}_a$ helyzetvektor-operátorokhoz hozzá kell venni az egyes részecskék spinvetületeinek operátorait $\hat{s}_{z,a}$, hogy megkapjuk a fizikai mennyiségek teljes rendszerét[51]. **Egy sokrészecskés rendszert páronként diszjunkt részrendszerek egyesítésére bonthatunk, s akkor a rendszer Hilbert-tere az egyes diszjunkt részrendszerek Hilbert-tereinek tenzori szorzata lesz.**

A továbbiakban megvizsgáljuk, milyen egy diszjunkt részekből összetett rendszer állapottere, Hamilton-operátora és stacionárius állapotai. Elegendő az A és B részek $U = A \cup B$ egyesítésével létrejött U rendszert vizsgálni. Kettőnél több részből álló rendszerekre kézenfekvő az általánosítás úgy, hogy rendre egy-egy újabb részt veszünk hozzá a rendszerhez, s minden lépést visszavezetünk két diszjunkt rész egyesítésére.

[51] Feltesszük, hogy a részecskék spinje, azaz $\hat{\vec{s}}_a^{\,2}$ operátoraik sajátértékei egyszer s mindenkorra adottak, nem változnak a kölcsönhatások során

5.1.1. Független részekből álló rendszer

Az állapottér. Vizsgáljunk olyan U rendszer, amely az egymással kölcsön nem ható, diszjunkt A és B részekből áll. A fejezet bevezetőjében elmondottak alapján az egyesített U rendszer $\mathcal{H}$ Hilbert-tere a részei $\mathcal{H}_A$ és $\mathcal{H}_B$ Hilbert-tereinek tenzori szorzata: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Annak, hogy a részrendszerek között nincsen kölcsönhatás, fontos következménye van. Léteznek egymástól függetlenül az A és a B részrendszerek „a maguk saját jogán", mint önálló, azaz mint szabad fizikai rendszerek. A $\mathcal{H}_A$ és a $\mathcal{H}_B$ Hilbert-terek nem hipotetikus matematikai konstrukciók csupán, hanem fizikailag megvalósítható állapotokat tartalmaznak.

Ha $|\phi_{A\ n}\rangle \in \mathcal{H}_A$ és $|\phi_{B\ m}\rangle \in \mathcal{H}_B$ rendre az egyes részrendszerek állapottereiben választott ortonormált bázisok, akkor az egyesített rendszer egy tetszőleges állapota

$$|\psi_U\rangle = \sum_{n,m} c_{n,m} |\phi_{A\ n}\rangle \otimes |\phi_{B\ m}\rangle \tag{5.1.11}$$

alakú, ahol $c_{n,m}$ tetszőleges komplex számok, amelyekre $\sum_{m,n} |c_{n,m}|^2 = 1$. A $|\phi_{A\ n}\rangle \otimes |\phi_{B\ m}\rangle$ állapotok ortonormált bázist alkotnak a $\mathcal{H}_U = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ tenzori szorzattérben, ha az n és m indexek egymástól függetlenül az összes lehetséges értékeiket befutják. Nyilvánvaló azonban az is, hogy tetszőleges komplex $c_{n,m}$ együtthatók esetén a $|\psi_U\rangle$ állapot általában nem írható $|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ **szeparálható** alakba. Az egyesített rendszernek vannak nem szeparálható, más néven **összefonódott állapotai.**

A szeparálható állapotokat az alábbi érdekes tulajdonság jellemzi: annak a valószínűségi amplitudója, hogy a tetszőleges $|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ szeparálható állapotban megtaláljuk a $|\phi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle$ szeparálható állapotot, azon független valószínűségi amplitudók szorzatával egyenlő, amelyek megadják, hogy a $|\psi_A\rangle$ állapotú A, ill. $|\psi_B\rangle$ állapotú B részrendszert rendre a $|\phi_A\rangle$, ill. $|\phi_B\rangle$ állapotban találjuk:

$$\langle \phi_A \phi_B | \psi_A \psi_B \rangle = \langle \phi_A | \otimes \langle \phi_B | | \psi_A \rangle \otimes |\psi_B\rangle = \langle \phi_A | \psi_A \rangle \langle \phi_B | \psi_B \rangle. \tag{5.1.12}$$

Ez azt jelenti, hogy ilyenkor az egyes részrendszerekre vonatkozó független valószínűségi amplitudók egyszerűen összeszorzódnak. Ekkor annak a valószínűsége, hogy az A részt a tetszőleges $|\phi_A\rangle \in \mathcal{H}_A$ állapotban, a B részt pedig a tetszőleges $|\phi_B\rangle \in \mathcal{H}_B$ állapotban találjuk, az egyes részekre vonatkozó találati valószínűségek szorzatai. Az tehát, hogy a nem összefonódott állapotú rendszer A, ill. B részét rendre a $|\phi_A\rangle$, ill. $|\phi_B\rangle$ állapotban találjuk egyidejűleg, valószínűségi értelemben két független esemény. Mondhatnánk, hogy természetesen ezt vártuk, hiszen nincsen kölcsönhatás az A és a B részek között. Mégis, ha a teljes rendszer összefonódott állapotban van, akkor nem tekinthető független két eseménynek, hogy A-t a $|\phi_A\rangle$, B-t pedig az $|\phi_B\rangle$ állapotban találjuk. Pl. ha $|\psi_U\rangle = c_1 |\phi_{A\ 1}\rangle \otimes |\phi_{B\ 1}\rangle + c_2 |\phi_{A\ 2}\rangle \otimes |\phi_{B\ 2}\rangle$, akkor a megfelelő valószínűségi amplitudó,

$$\begin{aligned} & \langle \phi_A | \otimes \langle \phi_B | (c_1 |\phi_{A\ 1}\rangle \otimes |\phi_{B\ 1}\rangle + c_2 |\phi_{A\ 2}\rangle \otimes |\phi_{B\ 2}\rangle) \\ = \ & c_1 \langle \phi_A | \phi_{A\ 1}\rangle \langle \phi_B | \phi_{B\ 1}\rangle + c_2 \langle \phi_A | \phi_{A\ 2}\rangle \langle \phi_B | \phi_{B\ 2}\rangle, \end{aligned} \tag{5.1.13}$$

két valószínűségi amplitudó összege, úgyhogy a megfelelő találati valószínűség,

$$|c_1\langle\phi_A|\phi_{A\ 1}\rangle\langle\phi_B|\phi_{B\ 1}\rangle + c_2\langle\phi_A|\phi_{A\ 2}\rangle\langle\phi_B|\phi_{B\ 2}\rangle|^2 \tag{5.1.14}$$

már nem a két részre vonatkozó valószínűségek szorzata, és az amplitudó két tagja interferenciát hoz létre a találati valószínűségben: megjelennek benne a

$$c_1^* c_2\langle\phi_A|\phi_{A\ 1}\rangle^\star\langle\phi_A|\phi_{A\ 2}\rangle\langle\phi_B|\phi_{B\ 1}\rangle^\star\langle\phi_B|\phi_{B\ 2}\rangle + \quad \text{c.c.} \tag{5.1.15}$$

interferencia tagok.

Hamilton-operátor. Képezzük most egy tetszőleges, szeparálható, azaz tenzori szorzat alakú állapot idő szerinti parciális deriváltját:

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t|\Psi\rangle &= i\hbar\partial_t(|\psi\rangle\otimes|\phi\rangle) = i\hbar[(\partial_t|\psi\rangle)\otimes|\phi\rangle + |\psi\rangle\otimes(\partial_t|\phi\rangle)] \\ &= (\hat{H}_A|\psi\rangle)\otimes|\phi\rangle + |\psi\rangle\otimes(\hat{H}_B|\phi\rangle) = (\hat{H}_A\otimes\hat{1}_B + \hat{1}_A\otimes\hat{H}_B)|\psi\rangle\otimes|\phi\rangle \\ &= (\hat{H}_A\otimes\hat{1}_B + \hat{1}_A\otimes\hat{H}_B)|\Psi\rangle \end{aligned} \tag{5.1.16}$$

adódik, miután felhasználtuk a részrendszerekre vonatkozó Schrödinger-egyenleteket. A kapott egyenlet az egyesített rendszerre vonatkozó Schrödinger-egyenlet, amelynek tetszőleges (nem csak szeparálható) $|\Psi\rangle$ állapotra fenn kell állnia. Innen azonosíthatjuk az egymással kölcsön nem ható részekből álló egyesített rendszer Hamilton-operátorát

$$\hat{H}_U = \hat{H}_A\otimes\hat{1}_B + \hat{1}_A\otimes\hat{H}_B \tag{5.1.17}$$

alakban.

A kölcsön nem ható részekből álló egyesített rendszer Schrödinger-egyenlete tehát általában

$$i\hbar\partial_t|\Psi\rangle = (\hat{H}_A\otimes\hat{1}_B + \hat{1}_A\otimes\hat{H}_B)|\Psi\rangle \tag{5.1.18}$$

alakú. Innen következik, hogy **kölcsön nem ható részekből álló rendszer Schrödinger-egyenletének szeparálható kezdőfeltételhez tartozó megoldása szeparálható állapot marad az időbeli fejlődés során.** természetesen egy összefonódott kezdeti állapothoz általában nem szeparálható megoldás tartozik.

Ha ugyanis a kezdeti állapot $|\Psi(0)\rangle = |\phi_A(0)\rangle\otimes|\phi_B(0)\rangle$, és $|\phi_A(t)\rangle$, ill. $|\phi_B(t)\rangle$ jelölik rendre a független részekre vonatkozó

$$i\hbar\partial_t|\phi_A(t)\rangle = \hat{H}_A|\phi_A(t)\rangle, \quad i\hbar\partial_t|\phi_B(t)\rangle = \hat{H}_B|\phi_B(t)\rangle \tag{5.1.19}$$

Schrödinger-egyenleteknek a $|\phi_A(0)\rangle$, ill. $|\phi_B(0)\rangle$ kezdeti feltételekhez tartozó megoldásait, akkor $|\Psi(t)\rangle = |\phi_A(t)\rangle\otimes|\phi_B(t)\rangle$ nyilvánvalóan megoldása az egyesített rendszerre vonatkozó Schrödinger-egyenletnek. Mivel adott kezdőfeltételhez a megoldás egyértelműen létezik, ezért ez a szeparálható megoldás a szeparálható kezdőfeltételhez tartozó az egyetlen megoldás.

A fizikában rendszerint a rövidség kedvéért a részrendszerek állapotterei felett ható egység-operátorokat nem szoktuk explicit módon kiírni, hanem az egyesített rendszer Hamilton-operátorát csak egyszerűen $\hat{H}_U = \hat{H}_A + \hat{H}_B$ alakban írjuk. **Kölcsön**

nem ható részekből álló rendszer Hamilton-operátora a részei Hamilton-operátorainak az összege. Hasonlóan bármely más, **additív fizikai mennyiség operátora** is

$$\hat{F}_U = \hat{F}_A \otimes \hat{1}_B + \hat{1}_A \otimes \hat{F}_B \tag{5.1.20}$$

alakú.

Stacionárius állapotok. Keressük végül a kölcsön nem ható részekből álló rendszer stacionárius állapotait, azaz a

$$(\hat{H}_A \otimes \hat{1}_B + \hat{1}_A \otimes \hat{H}_B)|\Phi\rangle = E_U|\Phi\rangle \tag{5.1.21}$$

stacionárius Schrödinger-egyenlet (időtől független) $|\Phi\rangle$ megoldásait.

Tudjuk, hogy az egyes részrendszerek stacionárius állapotai rendre eleget tesznek a

$$\hat{H}_A|\phi_{A\ n}\rangle = E_{A\ n}|\phi_{A\ n}\rangle, \quad \hat{H}_B|\phi_{B\ m}\rangle = E_{B\ m}|\phi_{B\ m}\rangle \tag{5.1.22}$$

stacionárius Schrödinger-egyenleteknek, és ortonormált teljes rendszereket alkotnak rendre a $\mathcal{H}_A$, ill. a $\mathcal{H}_B$ Hilbert-terekben. Ezért az általános megoldást a $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ tenzori szorzattérben

$$|\Phi\rangle = \sum_{n,m} c_{n,m}|\phi_{A\ n}\rangle \otimes |\phi_{B\ m}\rangle \tag{5.1.23}$$

alakban kereshetjük. Behelyettesítéssel kapjuk, hogy

$$\sum_{n,m} c_{n,m}(E_{A\ n} + E_{B\ m})|\phi_{A\ n}\rangle \otimes |\phi_{B\ m}\rangle = E_U \sum_{n,m} c_{n,m}|\phi_{A\ n}\rangle \otimes |\phi_{B\ m}\rangle. \tag{5.1.24}$$

Szorozzuk az egyenlet mindkét oldalát skalárisan a tetszőleges, rögzített $|\phi_{A\ n'}\rangle \otimes |\phi_{B\ m'}\rangle$ állapottal:

$$c_{n',m'}(E_{A\ n'} + E_{B\ m'}) = E_U c_{n',m'}. \tag{5.1.25}$$

Ennek az egyenletrendszernek csak olyan megoldásai vannak, hogy minden $c_{n',m'}$ együttható nulla egyetlen egy kivételével, és annak az együtthatónak az (n, m) indexei egyúttal az összetett rendszer állapotának és energiájának is jellemző indexei, merthogy ekkor az állapot szeparábilis,

$$|\phi_{A\ n}\rangle \otimes |\phi_{B\ m}\rangle \tag{5.1.26}$$

és energiája

$$E_{U\ (n,m)} = E_{A\ n} + E_{B\ m}. \tag{5.1.27}$$

Kölcsön nem ható részekből összetett rendszer stacionárius állapota tehát szeparálható, a részek megfelelő stacionárius állapotainak tenzori szorzata,

$$|\Phi\rangle = |\phi_{A\ n}\rangle \otimes |\phi_{B\ m}\rangle, \tag{5.1.28}$$

az energiája pedig a részek energiáinak az összege,

$$E_{U\ (n,m)} = E_{A\ n} + E_{B\ m}. \tag{5.1.29}$$

5.1.2. Kölcsönható részekből álló rendszer

Kölcsönható részekből álló rendszerről akkor tudunk beszélni, ha van annak értelme, hogy a részrendszerekről a köztük lévő kölcsönhatástól eltekintve beszéljünk. Ezen azt kell érteni, hogy a részek fizikai módszerekkel eltávolíthaók egymástól, aminek következtében megszűnik közöttük a kölcsönhatás, és a részek, mint aszimptotikusan szabad állapotok megvalósíthatók[52]. Gondoljunk pl. arra, hogy az atomból kiszabadítjuk az atomi elektronok egyikét.

Ekkor fenntartható az, hogy a részrendszereknek van saját Hamilton-operátoruk és a Hamilton-operátor sajátvektorai által kifeszített állapotterük. Az egyesített $U = A \cup B$ rendszer állapottere a részei állapottereinek a tenzori szorzata, $\mathcal{H}_{A\cup B} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ akkor is, ha a részek között kölcsönhatás jelenik meg. A tenzori szorzattérben konstruálhatunk egy teljes ortonormált bázist úgy, hogy vesszük a $\mathcal{H}_A$, ill. a $\mathcal{H}_B$ állapotterek egy-egy ortonormált bázisát, pl. $|\psi_n\rangle \in \mathcal{H}_A$ és $|\phi_m\rangle \in \mathcal{H}_B$, majd ezekből elkészítjük az összes lehetséges szeparálható,

$$|\Psi_{n,m}\rangle \equiv |\psi_n\rangle \otimes |\phi_m\rangle \tag{5.1.30}$$

alakú állapotot. Így ortonormált bázist kaptunk, amely a teljes $\mathcal{H}_U = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ tenzori szorzatteret kifeszíti. A tenzori szorzattérben nyilvánvalóan nem csak szeparálható állapotok vannak, mert a $|\Psi_{n,m}\rangle$ bázisvektorok tetszőleges lineáris kombinációi is benne vannak. **Az $A\cup B$ egyesített rendszer tetszőleges $|\Psi\rangle$ állapota előállítható a bevezetett ortonormált bázis lineáris szuperpozíciójaként:**

$$|\Psi\rangle = \sum_{n,m} c_{n,m} |\psi_n\rangle \otimes |\phi_m\rangle, \tag{5.1.31}$$

ahol a lineárkombinációs együtthatók:

$$c_{n,m} = \langle \Psi_{n,m} | \Psi \rangle, \tag{5.1.32}$$

s az állapotvektor normálási feltételéből $\sum_{n,m} |c_{n,m}|^2 = 1$.

A részek közötti kölcsönhatás ugyan nem változtatja meg az állapottér azon matematikai tulajdonságát, hogy a részek Hilbert-tereinek tenzori szorzata, de kihatással van a Hamilton-operátor matematikai alakjára és a Schrödinger-egyenlet megoldásainak tulajdonságaira. A kölcsönható részekből álló rendszer Hamilton-operátora nem azonos a részrendszerek Hamilton-operátorainak az összegével, hanem tartalmaz egy olyan $\hat{H}_{AB}$ kölcsönhatási tagot, amely sem az A, sem a B részrendszer állapotainak $\mathcal{H}_A$, ill. $\mathcal{H}_B$ terén nem egységoperátorként hat:

$$\hat{H}_{A\cup B} = \hat{H}_A \otimes \hat{1}_B + \hat{1}_A \otimes \hat{H}_B + \hat{H}_{AB}. \tag{5.1.33}$$

[52]Nem minden általános szabadsági fok képvisel olyan tulajdonságot, amely mint aszimptotikus szabad állapot megvalósítható. Pl. egy részecske x koordinátája, mint tulajdonság értelmes, de nem lehet olyan szabad állapotot létrehozni, amelynek csak az x-koordináta, mint tulajdonság az egyetlen jellemzője, anélkül, hogy a részecske y- és z-korrdináta-tulajdonsággal rendelkezne.

A $\hat{H}_{AB}$ kölcsönhatási Hamilton-operátornak köszönhetően **a Schrödinger-egyenlet szeparálható kezdőfeltételhez tartozó megoldása nem őrzi meg a szeparálható alakot.** Hasonlóképpen, a stacionárius Schrödinger-egyenlet megoldásait jelentő **stacionárius állapotok** a kölcsönhatási Hamilton-operátornak a jelenléte miatt általában **nem szeparálhatóak.**

5.1.3. N-részecskés rendszer koordináta-hullámfüggvénye

Az ábrázolás alapjául szolgáló F mennyiség(ek)nek a rendszer részecskéi helyzetvektorainak Descartes-komponenseit választjuk. Ekkor a koordináta-reprezentációban a rendszer hullámfüggvénye $3N$-változós, azaz N darab helyzetvektortól függ:

$$\psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) = \langle \vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N | \psi \rangle, \tag{5.1.34}$$

ahol

$$\hat{\vec{r}}_a | \vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N \rangle = \vec{r}_a | \vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N \rangle, \qquad a = 1, 2, \ldots, N \tag{5.1.35}$$

A skalárszozat

$$\begin{aligned} \langle \psi | \phi \rangle &= \int dx_1 \int dy_1 \int dz_1 \cdots \int dx_N \int dy_N \int dz_N \\ &\quad \psi^*(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \ldots, x_N, y_N, z_N) \phi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \ldots, x_N, y_N, z_N) \\ &= \int d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \psi^*(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) \phi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) \end{aligned} \tag{5.1.36}$$

alakú és a hullámfüggvényre a normálási feltétel:

$$\int d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N |\psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N)|^2 = 1. \tag{5.1.37}$$

A hullámfüggvény valószínűségi jelentéssel bír:

$$|\psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \tag{5.1.38}$$

annak a valószínűsége, hogy egy részecskét az $\vec{r}_1$ helyzetvektorú pont körüli $d\vec{r}_1$ térfogatelemben, egy másikat az $\vec{r}_2$ helyzetvektorú pont körüli $d\vec{r}_2$ térfogatelemben, stb. és végül egyet az $\vec{r}_N$ helyzetvektorú pont körüli $d\vec{r}_N$ térfogatelemben találunk. A helyzetvektor operátorának a hatása a koordináta-hullámfüggvényre most is a helyzetvektorral történő szorzás:

$$[\hat{\vec{r}}_a]_{\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N} \psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) = \vec{r}_a \psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N), \qquad a = 1, 2, \ldots, N. \tag{5.1.39}$$

Bármely más, a koordináta-reprezentációban diagonális mátrixszal ábrázolt fizikai mennyiség várható értéke:

$$\langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle = \int d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \psi^*(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) \hat{f}_{\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N} \psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N). \tag{5.1.40}$$

Ha a részecskéknek van spinjük, akkor a spinvetület lehetséges értékeitől, mint spinváltozóktól is függ a hullámfüggvény,

$$\psi(\vec{r}_1, \sigma_{1,z}, \ldots, \vec{r}_N, \sigma_{N,z}) \tag{5.1.41}$$

ahol $\sigma_{a,z}$ a $-s_a, -s_a+1, \ldots, s_a-1, s_a$ diszkrét értékeket felvevő spinváltozó, s_a az a-adik részecske spinje, állapotok skalárszorzata

$$\langle\phi|\psi\rangle = \int d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \sum_{\sigma_1,\ldots,\sigma_N} \phi^*(\vec{r}_1, \sigma_1, \ldots, \vec{r}_N, \sigma_N)\psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \ldots, \vec{r}_N, \sigma_N) \tag{5.1.42}$$

és tetszőleges $\hat{f}$ operátor várható értéke

$$\langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle = \int d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \sum_{\sigma_1,\ldots,\sigma_N} \psi^*(\vec{r}_1, \sigma_1, \ldots, \vec{r}_N, \sigma_N)\hat{f}_{\vec{r}_1,\sigma_1,\ldots,\vec{r}_N,\sigma_N}\psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \ldots, \vec{r}_N, \sigma_N). \tag{5.1.43}$$

5.1.4. N-részecskés rendszer koordináta-hullámfüggvényének valószínűségi jelentése*

Vizsgáljuk a továbbiakban az N-részecskés rendszer esetét. Mint azt a koordináta-hullámfüggvény értelmezése kapcsán megtanultuk, hogy

$$\rho(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N; t) \equiv |\langle\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N|\psi(t)\rangle|^2 \tag{5.1.1}$$

annak a valószínűségi sűrűsége, hogy a rendszert a t időpillanatban, a $\psi(t)$ állapotban olyan konfigurációban találjuk, amikor az 1-es, 2-es, stb. részecskéje rendre az $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$, …, $\vec{r}_N$ helyzetvektorú pontokban található[53]**.** Most azt mutatjuk meg, hogy **a $\rho(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N; t)$ valószínűségi sűrűség a**

$$\partial_t\rho(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N; t) + \sum_{a=1}^{N} \vec{\nabla}_a \vec{j}_a(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N; t) = 0 \tag{5.1.2}$$

kontinuitási egyenletnek tesz eleget, ahol

$$\begin{aligned}\vec{j}_a(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N; t) &= \frac{i\hbar}{2m_a}\Big(\psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N; t)\vec{\nabla}_a\psi^*(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N; t) \\ &\quad -\psi^*(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N; t)\vec{\nabla}_a\psi^(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N; t)\Big)\end{aligned} \tag{5.1.3}$$

az a-adik részecske valószínűségi áramsűrűsége a $|\psi(t)\rangle$ állapotban.

Írjuk fel a Schrödinger-egyenletet koordináta-reprezentációban,

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N; t) = \hat{H}_{\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N}\psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N; t), \tag{5.1.4}$$

[53] Egyelőre feltesszük, hogy a rendszert alkotó részecskék megkülönböztethetők. A megkülönbötethetelen részecskékből felépülő rendszerekkel később külön fogunk foglalkozni.

és ugyanennek az egyenletnek a komplex konjugáltját,

$$-i\hbar\partial_t\psi^\star(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;t) = \hat{H}^\star_{\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N}\psi^\star(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;t), \tag{5.1.5}$$

és használjuk fel, hogy a Hamilton-operátor

$$\hat{H} = \sum_{a=1}^{N}\frac{\hat{\vec{p}}_a^{\,2}}{2m_a} + V(\hat{\vec{r}}_1,\ldots,\hat{\vec{r}}_N), \tag{5.1.6}$$

aminek koordináta-reprezentációban a

$$\hat{H}_{\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N} = -\sum_{a=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2m_a}\vec{\nabla}_a^{\,2} + V(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N) \tag{5.1.7}$$

operátor felel meg. Ennek komplex konjugáltja önmaga, $\hat{H}^\star_{\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N} = \hat{H}_{\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N}$. Szorozzuk a Schrödinger-egyenlet mindkt́ oldalát $\psi^\star(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;t)$-vel, az egyenlet komplex konjugáltjának mindkét oldalát pedig $\psi(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;t)$-vel, majd vonjuk ki az utóbbi egyenlet megfelelő oldalait az első egyenlet megfelelő oldalaiból,

$$i\hbar[\psi^\star\partial_t\psi + \psi\partial_t\psi^\star] \quad = \quad -\sum_a\frac{\hbar^2}{2m_a}[\psi^*\vec{\nabla}_a^{\,2}\psi - \psi\vec{\nabla}_a^{\,2}\psi^*] + V[\psi^*\psi - \psi\psi^*] \tag{5.1.8}$$

ahol az áttekinthetőség kedvéért átmenetileg elhagytuk a függvények argumentumainak explicit kiírását. A hullámfüggvény értelmezése alapján

$$\psi(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;t) = \langle\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N|\psi(t)\rangle \tag{5.1.9}$$

és

$$|\psi(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;t)|^2 d\vec{r}_1\cdots d\vec{r}_N = \rho(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;t)d\vec{r}_1\cdots d\vec{r}_N \tag{5.1.10}$$

annak a valószínűsége, hogy a t időpillanatban az N darab részecskét olyan térbeli elrendezésben találjuk, amikor rendre egy-egy részecske tartózkodik az $\vec{r}_a$ $(a = 1, 2, \ldots, N)$ pontok körüli $d\vec{r}_a$ infinitezimális térfogatelemekben. A (5.1.8) egyenlet bal oldala éppen ennek a ρ találati va;ószínűségnek az idő szerinti első parciális deriváltja,

$$\partial_t\rho = +\sum_{a=1}^{N}\frac{i\hbar}{2m_a}[\psi^*\vec{\nabla}_a^{\,2}\psi - \psi\vec{\nabla}_a^{\,2}\psi^*] \tag{5.1.11}$$

Az egyenlet jobb oldalán alakítsuk át azonosan a szögletes zárójelben álló kifejezést:

$$\begin{aligned}
&\psi^*\vec{\nabla}_a^{\,2}\psi - \psi\vec{\nabla}_a^{\,2}\psi^* \\
&\quad= \quad \vec{\nabla}_a\cdot(\psi^*\vec{\nabla}_a\psi) - (\vec{\nabla}_a\psi^*)\cdot(\vec{\nabla}_a\psi) - \vec{\nabla}_a\cdot(\psi\vec{\nabla}_a\psi^*) + (\vec{\nabla}_a\psi)\cdot(\vec{\nabla}_a\psi^*) \\
&\quad= \quad \vec{\nabla}_a\cdot[\psi^*\vec{\nabla}_a\psi - \psi\vec{\nabla}_a\psi^*]
\end{aligned} \tag{5.1.12}$$

Ezt felhasználva és az tagokat egy oldalra rendezve a (5.1.11) egyenlet az alábbi alakot ölti,

$$\partial_t\rho + \sum_{a=1}^{N}\vec{\nabla}_a\left(\frac{-i\hbar}{2m_a}[\psi^*\vec{\nabla}_a\psi - \psi\vec{\nabla}_a\psi^*]\right) = 0. \tag{5.1.13}$$

Vezessük be a

$$\vec{j}_a(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;t) = \frac{-i\hbar}{2m_a}[\psi^*(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;t)\vec{\nabla}_a\psi(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;t) - \psi(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;t)\vec{\nabla}_a\psi^*(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N;t)] \tag{5.1.14}$$

vektorokat ($a = 1, 2, \ldots, N$). Ekkor a $\rho(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N; t)$ N-részecskés valószínűségi sűrűségre az alábbi egyenletet kapjuk a (5.1.13) egyenletből,

$$\partial_t \rho + \sum_{a=1}^{N} \vec{\nabla}_a \cdot \vec{j}_a = 0. \tag{5.1.15}$$

A kapott egyenlet fizikai jelentését jobban megértjük, ha egy részecske kivételével mindegyik részecske helyzetvektora szerint integráljuk az egyenlet mindkét oldalát a teljes V koordináta-térre. Tegyük fel, hogy a kiválasztott részecske, amelynek $\vec{r}_1 = \vec{r}$ helyzetvektorára nem integrálunk, az 1-es indexű. Ekkor bevezethetjük az 1-es részecske megtalálási valószínűségét jellemző **egy-részecskés valószínűségi sűrűséget,**

$$\rho_1(\vec{r}; t) = \int_V d\vec{r}_2 \int_V d\vec{r}_3 \cdots \int_V d\vec{r}_N |\psi(\vec{r}, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N; t)|^2 \tag{5.1.16}$$

és a

$$\begin{aligned} \vec{j}_1(\vec{r}; t) \quad = \quad & \frac{i\hbar}{2m_1} \int_V d\vec{r}_2 \int_V d\vec{r}_3 \cdots \int_V d\vec{r}_N [\psi(\vec{r}, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N; t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N; t) \\ & -\psi^*(\vec{r}, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N; t) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N; t)] \end{aligned} \tag{5.1.17}$$

egy-részecskés valószínűségi áramsűrűséget. Hasonló mennyiségeket értelmezhetünk minden egyes részecskére. Ekkor a (5.1.15) egyenlet az 1-es részecskére az alábbi alakot ölti:

$$\partial_t \rho_1(\vec{r}; t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_1(\vec{r}; t) + \sum_{a=2}^{N} \int_V d\vec{r}_2 \int_V d\vec{r}_3 \cdots \int_V d\vec{r}_N \vec{\nabla}_a \cdot \vec{j}_a(\vec{r}, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N; t) = 0. \tag{5.1.18}$$

Az egyenlet bal oldalán szereplő a indexre vonatkozó összeg minden tagjában a térfogati integrál átírható Gauss[54] tétele értelmében a V térfogatot határoló felületre vett felületi integrállá. Ha a V térfogat határai a térbeli végtelenben vannak, vagy a határokon a potenciál pozitív végtelen, akkor a határokon minden részecske valózínűségi áramsűrűségének el kell tűnnie. Ezért az egyenlet bal oldalán szereplő a-ra vonatkozó összeg minden tagja zérus[55] és az 1-es részecskére a

$$\partial_t \rho_1(\vec{r}; t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_1(\vec{r}; t) = 0 \tag{5.1.20}$$

[54]Karl Friedrich Gauss (1777-1855, német) matematikus és fizikus, aki kiemelkedő munkásságot folytatott a számelmélet, az asztronómia, a geometria és az elméleti fizika területén. Amellett, hogy a fizikában is számos eredmény fűződik a nevéhez, mint pl. a legkisebb kényszer elve, a lencsék leképezésének általános elmélete, az elektrosztatika Gauss-törvénye, a Gauss-mértékrendszer, stb., számos matematikai eredményét is állandóan felhasználja a fizika, mint pl. a legkisebb négyzetek módszerét, a Gauss-eloszlást, a felületek belső geometriájára vonatkozó eredményeit, a hipergeometrikus sorokat, a Gauss-számsíkot, a faktoriális függvényt, stb. Joggal illetik a ,,matematika fejedelme" megtisztelő címmel.

[55]Négyzetesen integrálható hullámfüggvény esetén a hullámfüggvénynek minden részecske $\vec{r}_a$ helyzetvektorától úgy kell függnie, hogy $r_a \to \infty$ esetén $\psi \sim r_a^{-\alpha}$ aszimptotikus viselkedést mutasson, ahol $\alpha > 3/2$, mert ekkor az adott helyzetvektor szerinti térfogati integrálás $R \to \infty$ felső határ esetén

$$\sim \int^R dr\ r^2 r^{-2\alpha} \sim R^{3-2\alpha} \to 0 \tag{5.1.19}$$

miatt konvergens eredményt ad. Ekkor viszont a valószínűségi áramsűrűség felületi integrálja $R \to \infty$ sugarú gömb felületére $\sim R^2 R^{-2\alpha-1} \sim R^{-2\alpha+1} < R^{-2} \to 0$ szerint eltűnő eredményt ad.

kontinuitási egyenletet kapjuk. Az összes többi részecskére is hasonló alakú kontinuitási egyenletet lehet levezetni.

A kontinuitási egyenlet értelme világosabbá válik, ha átírjuk az egyenletet **integrális alakba.** Integráljuk ezért az egyenlet mindkét oldalát egy tetszőleges V térfogatra, majd a valószínűségi áramsűrűség divergenciájának térfogati integrálját írjuk át a Gauss-tétel segítségével a V térfogatot határoló F felületre vett integrállá,

$$\frac{d}{dt}\int_V dV\rho_1(\vec{r};t) = -\oint_F df\vec{n}\cdot\vec{j}_1(\vec{r};t). \tag{5.1.21}$$

Ez az egyenlet azt fejezi ki, hogy **annak a**

$$w = \int_V dV\rho_1(\vec{r};t) \tag{5.1.22}$$

valószínűsége, hogy egy részecskét a V térfogatban találunk, azért változik csak időben, mert bizonyos valószínűséggel a részecske ki- és, ill. vagy beáramlik a térfogatot határoló F felületen keresztül. Ha a V térfogaton belül dw-vel megváltozik a találati valószínűség, akkor a V térfogaton kívül $-dw$-vel v 'altozik meg úgy, hogy a valószínűség ,,átáramlik" a V térfogatot határoló F zárt felületen. Másképpen ez azt jelenti, hogy **találati valószínűség nem keletkezik a V térfogaton belül a ,,semmiből" és nem is tűnik el ,,nyomtalanul". A kontinuitási egyenlet a találati valószínűség lokális megmaradását fejezi ki.** Másrészt, ha a (5.1.21) kontinitási egyenlet integrális alakjában V a teljes tér, azaz az egész térre integrálunk, akkor a

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho_1(\vec{r};t) = 0 \tag{5.1.23}$$

globális megmaradási törvényt találjuk: annak a valószínűsége, hogy a részecskét a térben valahol megtaláljuk, nem változik az idő függvényében. Tudjuk, hogy a fizikai állapotok úgy vannak normálva, hogy **ez a valószínűség a bizonyos esemény valószínűsége,azaz**

$$\int_V \rho_1(\vec{r};t) = 1. \tag{5.1.24}$$

A térben valahol bizonyosan ott van a részecske. Ilyen elméletet ,,alkottunk", amelyben ez igaz, azaz olyat, ami olyan fizikai rendszerek leírására alkalmas, amelyekben a részecskék nem keletkeznek és nem tűnnek el. **A kvantummechanika tehát olyan elmélet, amelyben a részecskék megmaradnak.** Ez természetesen nem azt jelenti, hogy a belső szerkezettel rendelkező objektumok nem eshetnek szét alkatrészeikre, az őket felépítő részecskékre.

Formailag a kontinuitási egyenlet differenciális, ill. integrális alakja pontosan olyan, mint rendre a klasszikus elektrodinamikában az elektromos töltés megmaradását kifejező kontinuitási egyenlet megfelelő alakjai.

Ha a rendszer egyetlen részecskét tartalmaz, azaz $N = 1$, akkor

$$\begin{aligned}\rho_1(\vec{r};t) &= |\psi(\vec{r};t)|^2,\\ \vec{j}(\vec{r};t) &= \frac{i\hbar}{2m}[\psi(\vec{r};t)\vec{\nabla}\psi^*(\vec{r};t) - \psi^*(\vec{r};t)\vec{\nabla}\psi(\vec{r};t)].\end{aligned} \tag{5.1.25}$$

5.1.5. A teljes impulzus

Részecskerendszer teljes impulzusának operátorát annak alapján definiálhatjuk, hogy megkeressük, mi az az operátor, ami a részecskerendszer koordináta-hullámfüggvényének

megváltozását generálja a rendszer $\vec{a}$ vektorral történő infinitezimális eltolása során. Legyen a K inerciarendszerben a rendszer hullámfüggvénye $\psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N)$. Legyen K' a térben eltolt koordinátarendszer, amelyben a részecskék $\vec{r}'_a$ helyzetvektoraira $\vec{r}_a = \vec{r}'_a + \vec{b}$, és legyen K'-ben a rendszer hullámfüggvénye $\psi'(\vec{r}'_1, \ldots, \vec{r}'_N)$. A két hullámfüggvény ugyanazt a fizikai állapotot írja le, ezért a tér azonos pontjában azonos az értékük:

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) &= \psi'(\vec{r}'_1, \ldots, \vec{r}'_N) = \psi'(\vec{r}_1 - \vec{b}, \ldots, \vec{r}_N - \vec{b}) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\sum_{a=1}^{N} \vec{b} \cdot \vec{\nabla}_a \right)^n \psi'(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) \\
&= e^{-\sum_{a=1}^{N} \vec{b} \cdot \vec{\nabla}_a} \psi'(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) \qquad (5.1.1)
\end{aligned}$$

A jobb oldalon álló operétor kitevőjében explicit módon megjeleníthetjük az egyes részecskék impulzusának $\hat{\vec{p}}_a$ operátorait,

$$\psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) = e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_{a=1}^{N} \vec{b} \cdot \hat{\vec{p}}_a} \psi'(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) \qquad (5.1.2)$$

ahonnan

$$\psi'(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) = \hat{U}(\vec{b}) \psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) \qquad (5.1.3)$$

és

$$\hat{U}(\vec{b}) = e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{a=1}^{N} \vec{b} \cdot \hat{\vec{p}}_a} \qquad (5.1.4)$$

pedig a térbeli eltolás operátora. Mivel az impulzus-operátorok önadjungált operátorok, azért az öszegük is az, úgyhogy a térbeli eltolás $\hat{U}(\vec{b})$ operátora unitér, $\hat{U}^{-1}(\vec{b}) = \hat{U}^{\dagger}(\vec{b})$. Infinitezimális eltolást véve, innen látjuk,

$$\hat{U}(\vec{b}) = \hat{1} + \frac{i}{\hbar} \sum_{a=1}^{N} \vec{b} \cdot \hat{\vec{p}}_a + \mathcal{O}(b^2) \qquad (5.1.5)$$

ami azt jelenti, hogy az infinitezimális eltolások generátora a

$$\hat{\vec{\mathcal{P}}} = \sum_{a=1}^{N} \hat{\vec{p}}_a \qquad (5.1.6)$$

operátor, amelynek segítségével a véges eltolások operátora

$$\hat{U}(\vec{b}) = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{b} \cdot \hat{\vec{\mathcal{P}}}}. \qquad (5.1.7)$$

Vizsgáljuk most meg, hogyan transzformálódik a $\hat{H}$ Hamilton-operátor térbeli eltolás során. A K rendszerben a Schrödinger-egyenlet

$$i\hbar \partial_t \psi = \hat{H} \psi, \qquad (5.1.8)$$

a K' rendszerben pedig

$$i\hbar\partial_t\psi' = \hat{H}'\psi'. \tag{5.1.9}$$

Az utóbbi egyenletbe helyettesítsük be $\psi' = \hat{U}(\vec{b})\psi$-t,

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t[\hat{U}(\vec{b})\psi] &= \hat{H}'\hat{U}(\vec{b})\psi, \\ \hat{U}(\vec{b})i\hbar\partial_t\psi &= \hat{H}'\hat{U}(\vec{b})\psi, \\ i\hbar\partial_t\psi &= \hat{U}^\dagger(\vec{b})\hat{H}'\hat{U}(\vec{b})\psi. \end{aligned} \tag{5.1.10}$$

Hasonlítsuk ezt össze a K rendszerben érvényes Schrödinger-egyenlettel, s akkor látjuk, hogy

$$\hat{H} = \hat{U}^\dagger(\vec{b})\hat{H}'\hat{U}(\vec{b}). \tag{5.1.11}$$

ill.

$$\hat{H}' = \hat{U}(\vec{b})\hat{H}\hat{U}^\dagger(\vec{b}). \tag{5.1.12}$$

Vegyünk most olyan fizikai rendszert, amelyik invariáns a térbeli eltolásokkal szemben. Egy ilyen rendszer esetén $\hat{H}' = \hat{H}$, aminek az a következménye, hogy a Hamilton-operátor felcserélhető a térbeli eltolások operátoraival,

$$[\hat{H}, \hat{U}(\vec{b})] = 0 \tag{5.1.13}$$

tetszőleges $\vec{b}$ vektor esetén. Ez viszont azt jelenti, hogy a Hamilton-operátor felcserélhető a térbeli eltolások $\hat{P}_x$, $\hat{P}_y$, $\hat{P}_z$ generátoraival,

$$[\hat{H}, \hat{\vec{\mathcal{P}}}] = 0. \tag{5.1.14}$$

Ennek az a következménye, hogy a $\hat{\vec{\mathcal{P}}}$ önadjungált operátor megmaradó fizikai mennyiség operátora, amely mennyiség akkor és csak akkor marad meg, ha a rendszer invariáns a térbeli eltolásokkal szemben. Ezt a fizikai mennyiséget ezért a rendszer teljes impulzusának kell nevezzük:

$$\hat{\vec{\mathcal{P}}} = \sum_{a=1}^{N} \hat{\vec{p}}_a, \tag{5.1.15}$$

ahol

$$\hat{\vec{p}}_a = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \vec{r}_a} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_a = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial x_a}, \frac{\partial}{\partial y_a}, \frac{\partial}{\partial z_a}\right) \tag{5.1.16}$$

az a-adik részecske impulzusának operátora.

A részecskerendszer teljes impulzusának operátora tehát az egyes részecskék impulzusoperátorainak vektori összege. Ez teljesen analóg azzal a klasszikus fizikai szabállyal, hogy a rendszer teljes impulzusának vektora az egyes részecskék impulzusvektorainak vektori összege.

5.1.6. Az eredő pályaimpulzusmomentum

Ha megvizsgáljuk, hogy mi az az operátor, amely egy N-részecskés rendszer[56] hullámfüggvényének megváltozását generálja a koordinátarendszer infinitezimális, térbeli elforgatása során, akkor azt kapjuk, hogy ez az operátor az egyes részecskék pályaimpulzusmomentum-operátorainak vektori összegzésével kapott operátor.

Valóban, legyen a rendszer hullámfüggvénye a K inerciarendszerben $\psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N,)$ és Hamilton-operátora $\hat{H}$, a K-hoz képest elforgatott K' rendszerben pedig a hullámfüggvény és a Hamilton-operátor rendre $\psi'(\vec{r}'_1, \ldots, \vec{r}'_N)$. Legyen a K' rendszer az, amelyet a K rendszer $\vec{n}$ irány ($\vec{n}^2 = 1$) körüli $\delta\varphi$ infinitezimális elforgatásával kapunk. Ekkor $\vec{r}'_a = \vec{r}_a - \vec{n}\delta\varphi \times \vec{r}_a$ ($a = 1, 2, \ldots, N$), és ugyanazt a fizikai állapotot írják le K-ban ill. K'-ben a megfelelő hullámfüggvények, tehát

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) &= \psi'(\vec{r}'_1, \ldots, \vec{r}'_N) = \psi'(\vec{r}_1 - \vec{n}\delta\varphi \times \vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N - \vec{n}\delta\varphi \times \vec{r}_N) \\
&= \psi'(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) - \delta\varphi \sum_{a=1}^{N} (\vec{n} \times \vec{r}_a) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_a} \psi'(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) \\
&= \psi'(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) - \delta\varphi \vec{n} \cdot \sum_{a=1}^{N} (\vec{r}_a \times \vec{\nabla}_{\vec{r}_a}) \psi'(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) \qquad (5.1.17)
\end{aligned}$$

ahonnan a hullámfüggvény az elforgatott K' rendszerben

$$\psi'(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) = \psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) + \delta\varphi \vec{n} \cdot \sum_{a=1}^{N} (\vec{r}_a \times \vec{\nabla}_{\vec{r}_a}) \psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) \qquad (5.1.18)$$

$\mathcal{O}(\delta\varphi)$ pontossággal. Ez azt jelenti, hogy a hullámfüggvény infinitezimális megváltozása a koordinátarendszer térbeli elforgatása miatt

$$\begin{aligned}
\delta\psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) &= \psi'(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) - \psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) \\
&= \delta\varphi \vec{n} \cdot \sum_{a=1}^{N} (\vec{r}_a \times \vec{\nabla}_{\vec{r}_a}) \psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) \\
&= \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \vec{n} \cdot \sum_{a=1}^{N} (\vec{r}_a \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}_a}) \psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) \\
&= \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \vec{n} \cdot \sum_{a=1}^{N} \hat{\ell}_a \psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) \\
&= \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \vec{n} \cdot \hat{\mathcal{L}} \psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) \qquad (5.1.19)
\end{aligned}$$

Ez azt mutatja, hogy a térbeli elforgatás generátora a

$$\hat{\mathcal{L}} = \sum_{a=1}^{N} \hat{\ell}_a \qquad (5.1.20)$$

önadjungált operátor.

Ezért **az N-részecskés rendszer eredő $\hat{\mathcal{L}}$ pályaimpulzusmomentumának az operátorát úgy kapjuk meg, hogy vektorilag öszegezzük az egyes részecskék**

[56] Ismét zérus spinű részecskékből álló rendszerről van szó.

$\hat{\vec{\ell}}_a$ **pályaimpulzusmomentumának operátorait:**

$$\hat{\vec{L}} = \sum_{a=1}^{N} \hat{\vec{\ell}}_a. \tag{5.1.21}$$

Az egyes pályaimpulzusmomentum-komponensek operátorai a

$$[\hat{\ell}_{a,j}, \hat{\ell}_{b,k}] = i\hbar\delta_{a,b}\epsilon_{j,k,l}\hat{\ell}_{a,l} \tag{5.1.22}$$

csererelációkat tesznek eleget, ugyanis bármely két, különböző részecskékhez tartozó pályaimpulzusmomentum-komponens operátora kommutál, hiszen egyik az egyik, a másik a másik részecske állapotainak terében hat[57]. Ezeknek a csererelációkat a segítségével könnyű belátni, hogy az eredő pályaimpulzusmomentum komponensei ugyanolyan alakú csererelációkat tesznek eleget, mint egy részecske pályaimpulzusmomentumának komponensei:

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar\epsilon_{j,k,l}\hat{L}_l. \tag{5.1.23}$$

Arról is meggyőződhetünk, hogy az eredő pályaimpulzusmomentum négyzetének operátorával valamennyi Descartes-komponensének operátora felcserélhető:

$$[\hat{L}_j, \hat{\vec{L}}^{\,2}] = 0. \tag{5.1.24}$$

A megfelelő operátorok koordináta-reprezentációban ugyanolyan alakúak, mint a pontrészecskére vonatkozó megfelelő operátorok, csak most a θ, φ szögek a rendszer tömegközéppontja helyzetvektorának irányát határozzák meg. Mivel matematikailag a sajátértékprobléma ugyanaz, mint az egy-részecskés esetben, ezért a sajátértékek is ugyanúgy kaphatók meg. Ezekszerint **az N darab (zérus spinű) részecskéből álló rendszer impulzusmomentumának sajátállapotai az eredő pályaimpulzusmpomentum négyzetének $\hbar^2 L(L+1)$ sajátértékeivel és az eredő pályaimpulzusmomentum tetszőlegesen felvett z-tengely irányába eső $\hat{L}_z$ vetületének $M\hbar$ sajátértékeivel jellemezhetők, ahol $L = 0, 1, 2, \ldots$ lehet és az egyes L kvantumszámokhoz tartozó állapotok alterei $(2L+1)$ dimenziósak, amelyben az $M = -L, -L+1, \ldots, 0, \ldots, L-1, L$ vetülethez tartozó állapotok egy ortonormált bázist alkotnak.**

Meg lehetne mutatni, hogy az $\vec{n}$ irány körüli véges α szögű elforgatás esetén a hullámfüggvény transzformációja

$$\psi'(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) = \hat{U}(\vec{n}, \alpha)\psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N), \tag{5.1.25}$$

ahol a transzformációt az

$$\hat{U}(\vec{n}, \alpha) = e^{\frac{i}{\hbar}\alpha\vec{n}\cdot\hat{\vec{L}}} \tag{5.1.26}$$

unitér operátor írja le. Hasonlóan, mint a térbeli eltolások esetén, most is beláthatjuk, hogy a Hamilton-operátor transzformációja

$$\hat{H}' = \hat{U}(\vec{n}, \alpha)\hat{H}\hat{U}^\dagger(\vec{n}, \alpha). \tag{5.1.27}$$

[57] Az N-részecskés rendszer Hilbert-tere az egyes részecskék Hilbert-tereinek tenzori szorzata.

Forgásszimmetrikus fizikai rendszer esetén $\hat{H}' = \hat{H}$, ami azt jelenti, hogy a Hamilton-operátor felcserélhető a térbeli elforgatások $\hat{U}(\vec{n}, \alpha)$ operátoraival,

$$[\hat{H}, \hat{U}(\vec{n}, \alpha)] = 0 \tag{5.1.28}$$

tetszőleges $\vec{n}$ irány és $\alpha \in [0, 2\pi]$ szög esetén. Ez akkor és csak akkor lehetséges, ha a Hamilton-operátor kommutál az eredő pályaimpulzusmomentum $\hat{\mathcal{L}}$ operátorának valamennyi Descartes-komponensével,

$$[\hat{H}, \hat{L}_i] = 0, \quad (i = x, y, z), \tag{5.1.29}$$

amiből az is következik, hogy a Hamilton-operátor az eredő pályaimpulzusmomentum négyzetének operátorával is kommutál,

$$[\hat{H}, \hat{\mathcal{L}}^2] = 0. \tag{5.1.30}$$

A (5.1.29) relációk fennállása azt is jelenti, hogy forgásszimmetrikus (és zérus spinű részecskékből álló) rendszer esetén az $\hat{\mathcal{L}}$ operátor, azaz a térbeli elforgatások generátora megmaradó fizikai mennyiség operátora, azaz Descartes-komponenseinek várható értéke időben állandó. Megmaradása a forgásszimmetria következménye, ezért **az $\hat{\mathcal{L}}$ operátort valóban a fizikai rendszer eredő pályaimpulzusmomentumának nevezhetjük.**

Ugyanakkor tudjuk, hogy az eredő pályaimpulzusmomentum komponenseinek egymással páronként képezett kommutátorai rendre kifejezhetők, mint a harmadik komponens lineáris kifejezése:

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{i,j,k}\hat{L}_k. \tag{5.1.31}$$

Egyidejűleg tehát csak a $\hat{H}$, $\hat{\mathcal{L}}^2$ és $\hat{L}_z$ operátoroknak lehet jól meghatározott értéke, azaz a forgásszimmetrikus (zérus spinű részecskékből felépített) rendszer stacionárius állapotait a megfelelő E, L, M_L kvantumszámokkal lehet jellemezni. A $\hat{H}$ Hamilton-operátor azonban a forgásszimmetria miatt nem függhet külön-külön tetszőlegesen az $\hat{L}_i$ Descartes-komponensektől, hanem azoknak csak a forgásszimmetrikus $\hat{\mathcal{L}}^2$ kifejezésétől. Ezért az energiasajátértékek általában L-től függenek[58], E_L,de az egyes E_L energiaszintek az eredő pályaimpulzusmomentum $\hat{L}_z$ vetületének M_L sajátértéke szerint $(2L+1)$-szeresen elfajultak, azaz $(2L+1)$-dimenziós multiplettek.

5.1.7. A pályaimpulzusmomentumok összeadása

A gyakorlat számára az az eset érdekes, amikor tudjuk, hogy a rendszert adott pályaimpulzusmomentumú állapotokban levő részecskék építik fel. Ekkor az N-részecskés rendszer a fentebb leírt teljes állapottérnek egy alterére van korlátozva. Melyik ez?

A megfelelő altér megkeresését 2 részecske, azaz 2 impulzusmomentum összeadásának példáján már az impulzusmomentumok összeadásáról szóló fejezetben általános alakban megadtuk. (A fejezetben $\hat{\vec{\mathcal{J}}}_a$-t rendre $\hat{\vec{\ell}}_a$-val, $\hat{\vec{\mathcal{J}}}$-t $\hat{\vec{\mathcal{L}}}$-lel kell helyettesíteni, ill. ezen operátorok sajátértékeit a megfelelő operátorok sajátértékeivel kell helyettesíteni.)

Ismétlésképpen részletesen leírjuk az általános összeadási szabály alkalmazását. Legyenek az egyes részecskék pályaimpulzusmomentumai $\hat{\vec{\ell}}_a$ $(a = 1, 2)$, az $\hat{\vec{\ell}}_a^2$, $\hat{\ell}_{a\ z}$ operátor-párok közös

[58] Előfordulhat, hogy a rendszer további szimmetriával is rendelkezik és ezért az energiaszintjei az L lehetséges értékei szerint is elfajultak. Ilyen eset a H-atom energiaszintjeinek pályaimpulzusmomentum szerinti elfajulása.

sajátvektorai rendre $|\ell_a,\ m_a\rangle$,

$$\hat{\boldsymbol{\ell}}_a^2|\ell_a,\ m_a\rangle = \hbar^2\ell_a(\ell_a+1)|\ell_a,\ m_a\rangle,\quad \hat{\ell}_{a\ z}|\ell_a,\ m_a\rangle = \hbar m_a|\ell_a,\ m_a\rangle\quad (a=1,2). \tag{5.1.1}$$

Legyen az egyik részecske az ℓ_1-hez tartozó $|\ell_1, m_1\rangle$ állapotok valamelyikében, a másik részecske az ℓ_2-höz tartozó $|\ell_2, m_2\rangle$ állapotok valamelyikében. Nyilvánvalóan az $[\hat{\ell}_{a,i}, \hat{\ell}_{b,j}] = i\hbar\epsilon_{i,j,k}\hat{\ell}_{a,k}\delta_{a,b}$ kommutátor-relációk állnak fenn, hiszen az egyes részecskék pályaimpulzusmomentum-operátorainak Descartes-komponenseire a szokásos cserererelćiók érvényesek, a különböző részecskék pályaimpulzusmomentumának komponensei pedig egymással felcserélhetők. Következésképpen $[\hat{\boldsymbol{\ell}}_a^2, \hat{\boldsymbol{\ell}}_b^2] = 0$, $[\hat{\boldsymbol{\ell}}_a^2, \hat{\ell}_{b,z}] = 0$ csererelációk is fennállnak. Mindez azt jelenti, hogy a 2-részecskés rendszer impulzusmomentum-állapotainak egyidejűleg mérhető jellemzői $\hat{\boldsymbol{\ell}}_1^2$, $\hat{\boldsymbol{\ell}}_2^2$, $\hat{\ell}_{1,z}$ és $\hat{\ell}_{2,z}$. Az impulzusmomentum-állapotok teljes rendszere tehát az $|\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle$ állapotok teljes rendszere, amely $(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)$ darab független állapotot tartalmaz, s ezekre fennállnak a

$$\begin{aligned}
&\hat{\boldsymbol{\ell}}_1^2|\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle = \hbar^2\ell_1(\ell_1+1)|\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle,\\
&\hat{\boldsymbol{\ell}}_2^2|\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle = \hbar^2\ell_2(\ell_2+1)|\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle,\\
&\hat{\ell}_{1,z}|\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle = \hbar m_1|\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle,\\
&\hat{\ell}_{2,z}|\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle = \hbar m_2|\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle.
\end{aligned} \tag{5.1.2}$$

Ezek a bázisállapotok ortonormált teljes rendszert alkotnak a 2-részecskés rendszer impulzusmomentum-állapotainak $(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)$ dimenziós Hilbert-terében.

Vizsgáljuk most meg azt, hogy milyen cserererećiók állnak fenn az eredő $\hat{\boldsymbol{\mathcal{L}}} = \hat{\boldsymbol{\ell}}_1 + \hat{\boldsymbol{\ell}}_2$ pályaimpulzusmomentum négyzetének $\hat{\boldsymbol{\mathcal{L}}}^2$ operátora, a z-irányú vetületének $\hat{L}_z$ operátora és az egyes részecskék $\hat{\boldsymbol{\ell}}_a^2$ és $\hat{\ell}_{a,z}$ operátorai között. Mivel $[\hat{\ell}_{a,i}, \hat{\boldsymbol{\ell}}_b^2] = 0$, azért

$$[\hat{\boldsymbol{\ell}}_a^2, \hat{\boldsymbol{\mathcal{L}}}^2] = 0 \tag{5.1.3}$$

azaz $\hat{\boldsymbol{\mathcal{L}}}^2$, $\hat{\boldsymbol{\ell}}_1^2$ és $\hat{\boldsymbol{\ell}}_2^2$ egyidejűleg mérhetők, azaz az eredő pályaimpulzusmomentum L és az egyes részecskék ℓ_1 és ℓ_2 impulzusmomentuma egyidejűleg lehet jól definiált. Ugyanakkor tudjuk, hogy

$$[\hat{L}_z, \hat{\boldsymbol{\mathcal{L}}}^2] = 0 \tag{5.1.4}$$

és könnyen beláthatjuk, hogy

$$[\hat{L}_z, \hat{\ell}_{a,z}] = [\hat{\ell}_{1,z} + \hat{\ell}_{2,z}, \hat{\ell}_{a,z}] = 0, \tag{5.1.5}$$

ami azt jelenti, hogy L, ℓ_1 és ℓ_2 mellett M is egyidejűleg jól meghatározott lehet. Arról viszont könnyen meggyőződhetünk, hogy $[\hat{\ell}_{a,z}, \hat{\boldsymbol{\mathcal{L}}}^2] \neq 0$, és ezért az L, ℓ_1, ℓ_2 és M kantumszámokkal jellemzett állapotokban m_1 és m_2 nem lehet jól meghatározott. Az cserererelációk tehát arra utalnak, hogy az impulzusmomentum-állapotok terében létezik egy másik bázis is, amelyhez tartozó állapotokat az L, ℓ_1, ℓ_2 és M kvantumszámok együttesen jellemeznek. Jelöljük ezeket az állapotokat

$$|L, M, \ell_1, \ell_2\rangle \tag{5.1.6}$$

ket-vektorokkal. Ezek kielégítik az alábbi sajátérték-egyenleteket:

$$\begin{aligned}
&\hat{\boldsymbol{\mathcal{L}}}^2|L, M, \ell_1, \ell_2\rangle = \hbar^2 L(L+1)|L, M, \ell_1, \ell_2\rangle,\\
&\hat{L}_z|L, M, \ell_1, \ell_2\rangle = \hbar M|L, M, \ell_1, \ell_2\rangle,\\
&\hat{\boldsymbol{\ell}}_1^2|L, M, \ell_1, \ell_2\rangle = \hbar^2\ell_1(\ell_1+1)|L, M, \ell_1, \ell_2\rangle,\\
&\hat{\boldsymbol{\ell}}_2^2|L, M, \ell_1, \ell_2\rangle = \hbar^2\ell_2(\ell_2+1)|L, M, \ell_1, \ell_2\rangle.
\end{aligned} \tag{5.1.7}$$

Viszont ezek az állapotok nem sajátvektorai az $\hat{\ell}_{1,z}$ és $\hat{\ell}_{2,z}$ vetületeknek.

A 2-részecskés rendszer eredő pályaimpulzusmomentumának lehetséges értékei:

$$L = |\ell_1 - \ell_2|, |\ell_1 - \ell_2| + 1, \ldots, \ell_1 + \ell_2 - 1, \ell_1 + \ell_2, \tag{5.1.8}$$

és minden L-hez tartozó altér $(2L+1)$-szeresen elfajult, azaz a lehetséges M értékek:

$$M = -L, -L+1, \ldots, 0, \ldots, L-1, L. \tag{5.1.9}$$

Vegyük észre, hogy ez pontosan

$$\sum_{L=|\ell_1-\ell_2|}^{\ell_1+\ell_2} (2L+1) = (2\ell_1+1)(2\ell_2+1) \tag{5.1.10}$$

darab páronként ortogonális $|L, M, \ell_1, \ell_2\rangle$ bázisállapot létezését jelenti. Ez pontosan ugyanannyi bázisállapot, mint ahány páronként ortogonális bázisállapot található a $|\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle$ bázisban. Ez azt jelenti, hogy **a 2-részecskés rendszer szóbanforgó alterében az adott L, M kvantumszámokkal jellemzett $|L, M; \ell_1, \ell_2\rangle$ állapotok ugyanúgy meghatároznak egy bázist, mint az $|\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle$ szorzatalakú állapotok.** Ezért létezik olyan bázistranszformáció, amelyik az egyik bázist átviszi a másikba:

$$|L, M; \ell_1, \ell_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} (LM|\ell_1 m_1 \ell_2 m_2) |\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle, \tag{5.1.11}$$

ahol **a bázistranszformáció mátrixának elemei az ún.** $(LM|\ell_1 m_1 \ell_2 m_2)$ **Clebsch-Gordan-együtthatók.**

5.2. A teljes impulzusmomentum

Megtanultuk, hogy az eredő pályaimpulzusmomentum operátora a hullámfüggvény transzformációját generálja a koordináta-rendszer térbeli elforgatásai során, ha olyan fizikai rendszer hullámfüggvényéről van szó, amelynek részecskéi $s = 0$ spinűek. Feltehetjük azt a kérdést, hogy mi az az operátora, amelyik olyan fizikai rendszer hullámfüggvényének transzformációját generálja a koordináta-rendszer térbeli elforgatásai során, amelynek részecskéi zérustól különböző spinűek. A matematika csoportelmélet nevű ága erre azt a választ adja, hogy a térbeli elforgatások generátorai olyan $\hat{J}_i$ $(i = 1, 2, 3)$ önadjungált operátorok, amelyek a

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\epsilon_{i,j,k}\hat{J}_k, \quad [\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_i] = 0 \tag{5.2.1}$$

csererelációkat elégítik ki, ahol $\hat{J}_1 = \hat{J}_x$, $\hat{J}_2 = \hat{J}_y$, $\hat{J}_3 = \hat{J}_z$ a $\hat{\vec{J}}$ axiálvektor-operátor Descartes-komponenseinek tekinthetők, és

$$\hat{\vec{J}}^2 = \sum_{i=1}^{3} \hat{J}_i^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2. \tag{5.2.2}$$

A fenti összefüggések tekintetében teljesen mindegy, hogy egyetlen részecske vagy egy részecskékből bonyolult módon felépülő fizikai rendszer hullámfüggvényének transzformációját meghatározó generátorokról beszélünk.

Hasonlóan, mint egyetlen részecske esetén beláthatjuk, hogy a fizikai rendszer elforgatási szimmetriájának szükséges és elégséges feltétele, hogy a $\hat{J}_i$ generátorok felcserélhetők legyenek a Hamilton-operátorral. Ekkor a $\hat{\vec{J}}^2$ operátor is felcserélhető a Hamilton-operátorral. Ebből következik, hogy a forgásszimmetria következménye, hogy a $\hat{J}_i$ generátorok és velük együtt a $\hat{\vec{J}}^2$ operátor is megmaradó fizikai mennyiségek operátorai. Azt a fizikai mennyiséget, amely a térbeli elforgatási szimmetria következtében megmarad, a fizikai rendszer teljes impulzusmomentumának nevezzük.

Hasonlóan, mint ahogy beláttuk, hogy egy fizikai rendszer eredő pályaimpulzusmomentumának operátora az egyes részecskék pályaimpulzusmomentum-operátorainak vektori összege, ugyanúgy a fizikai rendszer teljes impulzusmomentumának $\hat{\vec{J}}$ operátora az egyes részecskék $\hat{\vec{j}}_a$ $(a = 1, 2, \ldots, N)$ teljes impulzusmomentuma operátorainak vektori összege:

$$\hat{\vec{J}} = \sum_{a=1}^{N} \hat{\vec{j}}_a, \tag{5.2.3}$$

ahol az egyes részecskék teljes impulzusmomentumának operátora a megfelelő pályaimpulzusmomentum-operátor és spon-operátor összege,

$$\hat{\vec{j}}_a = \hat{\vec{\ell}}_a + \hat{\vec{s}}_a. \tag{5.2.4}$$

Ha bevezetjük a fizikai rendszer eredő pályaimpulzusmomentumának

$$\hat{\vec{L}} = \sum_{a=1}^{N} \hat{\vec{\ell}}_a \tag{5.2.5}$$

operátorát és eredő spinjének

$$\hat{\vec{S}} = \sum_{a=1}^{N} \hat{\vec{s}}_a \tag{5.2.6}$$

operátorát, akkor írhatjuk, hogy a fizikai rendszer teljes impulzusmomentumának operátora a rendszer eredő pályaimpulzusmomentuma és eredő spinje operátorának összege:

$$\hat{\vec{J}} = \sum_{a=1}^{N} \hat{\vec{j}}_a = \sum_{a=1}^{N} (\hat{\vec{\ell}}_a + \hat{\vec{s}}_a) = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}. \tag{5.2.7}$$

Itt az egy-részecskés operátorok az alábbi csererelációkat elégítik ki,

$$\begin{aligned}
&[\hat{j}_{ai}, \hat{j}_{bj}] = i\hbar\delta_{a,b}\epsilon_{i,j,k}\hat{j}_{ak}, \quad [\hat{\ell}_{ai}, \hat{\ell}_{bj}] = i\hbar\delta_{a,b}\epsilon_{i,j,k}\hat{\ell}_{ak}, \quad [\hat{s}_{ai}, \hat{s}_{bj}] = i\hbar\delta_{a,b}\epsilon_{i,j,k}\hat{s}_{ak}, \\
&[\hat{\vec{j}}_a^2, \hat{j}_{bi}] = 0, \quad [\hat{\vec{\ell}}_a^2, \hat{\ell}_{bi}] = 0, \quad [\hat{\vec{s}}_a^2, \hat{s}_{bi}] = 0 \\
&[\hat{\vec{j}}_a^2, \hat{\vec{\ell}}_b^2] = 0, \quad [\hat{\vec{j}}_a^2, \hat{\vec{s}}_b^2] = 0, \quad [\hat{\vec{\ell}}_a^2, \hat{\vec{s}}_b^2] = 0, \\
&[\hat{\vec{j}}_a^2, \hat{\ell}_{az}] \neq 0, \quad [\hat{\vec{j}}_a^2, \hat{s}_{az}] \neq 0, \quad [\hat{\ell}_{az}, \hat{s}_{bz}] = 0.
\end{aligned} \tag{5.2.8}$$

Az impulzusmomentum-állapotok terében létezik egy szeparált egy-részecske állapotok tenzori szorzatából álló bázis:

$$|\ell_1, m_1, s_1, m_{s1}, \ldots, \ell_N, m_N, s_N, m_{sN}\rangle = |\ell_1, m_1\rangle \otimes |s_1, m_{s1}\rangle \otimes \cdots \otimes |\ell_N, m_N\rangle \otimes |s_N, m_{sN}\rangle. \tag{5.2.9}$$

Az egy-részecskés operátorok csererelációi alapján, mint az korábbi tanulmányainkból tudjuk egy másik lehetséges bázis, amikor az egyes részecskék j_a teljes impulzusmomentumát, a részecskék teljes impulzusmomentumának m_{ja} vetületét, valamint a részecskék ℓ_a pályamomentumát és s_a spinjét adjuk meg:

$$|j_1, m_{j1}, \ell_1, s_1, \ldots, j_N, m_{jN}, \ell_N, s_N\rangle = |j_1, m_{j1}, \ell_1, s_1\rangle \otimes \cdots \otimes |j_N, m_{jN}, \ell_N, s_N\rangle, \tag{5.2.10}$$

ahol

$$|j_a, m_{ja}, \ell_a, s_a\rangle = \sum_{m_a, m_{sa}} (j_a m_{ja} | \ell_a m_a s_a m_{sa}) |\ell_a, m_a\rangle \otimes |s_a, m_{sa}\rangle. \tag{5.2.11}$$

A továbbiakban azzal foglalkozunk, hogy hogyan lehet az előbbi, egy-részecskés jellemzők tekintetében szeparált bázisok helyett olyan bázisokat találni, amelyek a teljes impulzusmometum négyzetének és vetületének, azaz rendre $\hat{\vec{J}}^2$-nek és $\hat{J}_z$-nek sajátállapotai. Erre kétféle lehetőséget érdemes megtárgyalni:

1. *A $j-j$-csatolás.* Ennek lényege, hogy az impulzusmomentumok összeadásának szabályát alkalmazva az egyes részecskék teljes impulzusmomentumait egymást követő lépésekben összecsatoljuk, először $\hat{\vec{j}}_1$-et és $\hat{\vec{j}}_2$-t $\hat{\vec{j}}_{1,2}$-vé, majd $\hat{\vec{j}}_{1,2}$-t és $\hat{\vec{j}}_3$-at $\hat{\vec{j}}_{1,2,3}$-má, stb. míg végül az utolsó részecske teljes impulzusmomentumát is összecsatolva az előzőek eredőjéhez, megkapjuk a $\hat{\vec{J}}$ teljes impulzusmomentumot. A $j-j$-csatolással kapott bázisállapotok használata akkor célszerű, ha az egyes részecskék pályamomentuma és spinje között a kölcsönhatás sokkal erősebb, mint a különböző részecskék teljes impulzusmomentumai közötti kölcsönhatás. Ekkor az egyes részecskék teljes impulzusmomentuma négyzetének operátorai felcserélhetők vagy ,,majdnem felcserélhetők" a rendszer Hamilton-operátorával, azaz a Hamilton-operátor mátrixa a $j-j$-csatolással szerkesztett bázisban ,,csaknem diagonális" (abszolut értékben kicsinyek a nem diagonális mátrixelemek a diagonális mátrixelemekhez képest). Nehéz atomok esetében általában a $j-j$-csatolás bázisfüggvényei jó közelítését adják az energiasajátállapotok hullámfüggvényeinek.

   Jelölje $\hat{\vec{j}}_{1,2,\ldots,n}$ jelöli az első n darab részecske teljes impulzusmomentumainak az összegét. Az eljárás azért lehetséges, mert

$$[\hat{\vec{J}}^2, \hat{\vec{j}}_a^2] = 0, \quad [\hat{J}_z, \hat{\vec{j}}_a^2] = 0, \quad [\hat{\vec{J}}^2, \hat{\vec{j}}_{1,2,\ldots,n}^2] = 0, \quad [\hat{\vec{j}}_{1,2,\ldots,n}^2, \hat{\vec{j}}_a^2] = 0,$$
$$[\hat{\vec{j}}_{1,2,\ldots,n}^2, \hat{\vec{j}}_{1,2,\ldots,n'}^2] = 0. \tag{5.2.12}$$

Jelöljük a $j-j$-csatolás így kapott ortonormált bázis vektorait

$$|J, M_J, j_{1,2}, j_{1,2,3}, \ldots, j_{1,2,3,\ldots,N-1}, j_1, \ldots, j_N\rangle \tag{5.2.13}$$

vektorokkal[59], ezekre fennállnak a

$$\begin{aligned}
&\hat{\vec{J}}^2|J, M_J, j_{1,2}, j_{1,2,3}, \ldots, j_{1,2,\ldots,N-1}, j_1, \ldots, j_N\rangle = \\
&\quad \hbar^2 J(J+1)|J, M_J, j_{1,2}, j_{1,2,3}, \ldots, j_{1,2,\ldots,N-1}, j_1, \ldots, j_N\rangle, \\
&\hat{J}_z|J, M_J, j_{1,2}, j_{1,2,3}, \ldots, j_{1,2,\ldots,N-1}, j_1, \ldots, j_N\rangle = \\
&\quad \hbar M_J|J, M_J, j_{1,2}, j_{1,2,3}, \ldots, j_{1,2,\ldots,N-1}, j_1, \ldots, j_N\rangle \\
&\hat{\vec{j}}_a^2|J, M_J, j_{1,2}, j_{1,2,3}, \ldots, j_{1,2,\ldots,N-1}, j_1, \ldots, j_N\rangle = \\
&\quad \hbar^2 j_a(j_a+1)|J, M_J, j_{1,2}, j_{1,2,3}, \ldots, j_{1,2,\ldots,N-1}, j_1, \ldots, j_N\rangle, \\
&\hat{\vec{j}}_{1,2,\ldots,n}^2|J, M_J, j_{1,2}, j_{1,2,3}, \ldots, j_{1,2,\ldots,N-1}, j_1, \ldots, j_N\rangle = \\
&\quad \hbar^2 j_{1,2,\ldots,n}(j_{1,2,\ldots,n}+1)|J, M_J, j_{1,2}, j_{1,2,3}, \ldots, j_{1,2,\ldots,N-1}, j_1, \ldots, j_N\rangle
\end{aligned} \tag{5.2.14}$$

sajátérték-egyenletek.

Példaként nézzük meg 3 részecske esetét. Az 1-es és 2-es részecske teljes impulzusmomentumának összecsatolása a

$$|j_{1,2}, m_{1,2}, j_1, j_2\rangle = \sum_{m_{j1}, m_{j2}} (j_{1,2}, m_{1,2}|j_1, m_{j1}, j_2, m_{j2})|j_1, m_{j1}\rangle \otimes |j_2, m_{j2}\rangle \tag{5.2.15}$$

állapotot eredményezi, ahol $j_{1,2} = |j_1 - j_2|,\ |j_1 - j_2| + 1,\ \ldots,\ j_1 + j_2 - 1,\ j_1 + j_2$ és $m_{1,2} = -j_{1,2}, -j_{1,2} + 1, \ldots, j_{1,2} - 1, j_{1,2}$ értékű lehet. A harmadik részecske teljes impulzusmomentumának hozzácsatolása eredményezi a rendszer teljes impulzusmomentumának sajátállapotait:

$$\begin{aligned}
&|J, M_J, j_{1,2}, j_1, j_2, j_3\rangle \\
&\quad = \sum_{m_{1,2}, m_3} (J, M_J|j_{1,2}, m_{1,2}, j_3, m_{j3})|j_{1,2}, m_{1,2}\rangle \otimes |j_3, m_{j3}\rangle \\
&\quad = \sum_{m_{1,2}, m_{j1}, m_{j2}, m_{j3}} (J, M_J|j_{1,2}, m_{1,2}, j_3, m_{j3})(j_{1,2}, m_{1,2}|j_1, m_{j1}, j_2, m_{j2}) \\
&\qquad\qquad |j_1, m_{j1}\rangle \otimes |j_2, m_{j2}\rangle \otimes |j_3, m_{j3}\rangle,
\end{aligned} \tag{5.2.16}$$

ahol $J = |j_{1,2} - j_3|, |j_{1,2} - j_3| + 1, \ldots, j_{1,2} + j_3 - 1, j_{1,2} + j_3,\ j_{1,2} = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \ldots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2$ és $M_J = -J, -J + 1, \ldots, J - 1, J$.

2. *Az $L-S$-csatolás, vagy más néven Russell-Saunders-csatolás.* ennek lényege, hogy az egyes részecskék pályamomentumait előbb összecsatoljuk az eredő L páltamomentummá, az egyes részecskék spinjeit pedig az S eredő spinné, ezeket adjuk össze a rendszer J teljes impulzusmomentumává. Ezt a bázist akkor

[59] Az ortogonalitást az impulzusmomentum összeadás szabályai automatikusan biztosítják, a normálás alkalmas normálási együtthatók választásával biztosítható.

érdemes használni, ha az egyes részecskék spinje és pályamomentuma között a kölcsönhatás gyenge, viszont az eredő pályamomentum és az eredő spin között jelentős a kölcsönhatás. Ez végső soron megint azt jelenti, hogy akkor célszerű az $L-S$-csatolás használata, ha ebben a csatolásban a rendszer Hamilton-operátora diagonális, vagy ,,csaknem diagonális". A könnyű atomok esetében általában az $L-S$-csatolás bázisfüggvényei adják az energiasajátállapotok hullámfüggvényeinek jobb közelítéseit.

Érdemes megjegyezni, hogy az eredő spin és az eredő pályaimpulzusmomentum közötti spin-pálya kölcsönhatás operátorában fellépő $\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}$ szorzat

$$\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} = \frac{1}{2}[\hat{\vec{J}}^2 - \hat{\vec{L}}^2 - \hat{\vec{S}}^2] \tag{5.2.17}$$

alakba írható, ami azt jelenti, hogy ennek a kölcsönhatásnak a mátrixa az $L-S$-csatolású bázisban diagonális:

$$\frac{1}{2}\hbar^2[J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]. \tag{5.2.18}$$

A könnyű atomok energiaszintjeinek spin-pálya-kölcsönhatás miatti felhasadása tehát az L és S kvantumszámokkal jellemezhető: az eredetileg adott L-lel jellemzett energiaszinthez tartozó multiplett a J (és S) különböző értékeinek megfelelő további energiaszintekre hasad fel a spinpálya-kölcsönhatás következtében.

5.3. Részecskeazonosság. Fermionok és bozonok

A részecskeazonosság kvantummechanikai értelmezése. **A részecskék azonossága a kvantummechanika szerint azt jelenti, hogy az azonos részecskéket semmilyen fizikai módszerrel nem lehet megkülönböztetni egymástól.** A részecskék azonosságának ez az értelmezése sokkal szigorúbb, mint a klasszikus fizikában a részecskék azonosságának fogalma. Ott az egyes részecskéket meg lehet jelölni, és külön-külön nyomon lehet követni a mozgásukat. Mindegyiknek jól definiált pályája van. Ugyanezt nem lehet a kvantummechanikában elmondani. Ha egy fizikai rendszer azonos részecskékből áll, akkor semmilyen fizikai módszerrel nem lehet megjelölni vagy beazonosítani ezeket, hogy melyik az 1-es, a 2-es, stb. részecske. Csak annyit lehet tudni, hogy hány darab azonos részecske van a rendszerben, de nem lehet őket ,,cimkével", ,,sorszámmal", stb. ellátni.

Azonos részecskék rendszerének hullámfüggvénye. **Ha N darab azonos részecskéből áll a fizikai rendszer, akkor annak a hullámfüggvénye tetszőleges két részecske felcserélésével szemben vagy szimmetrikus, vagy antiszimmetrikus.** Ezt a következőképpen láthatjuk be. Jelölje x_i $(i = 1, 2, \ldots, N)$ az i-edik részecske összes szabadsági fokait, azaz legyen $x_i = (\vec{r}_i, \sigma_i, \ldots)$ az i-edik részecske

heyzetvektorának, spinvetületének, egyéb szabadsági fokainak összessége. Tetszőleges két részecske (mondjuk az j-edik és a k-adik) felcserélése esetén a rendszer minden mérhető tulajdonságának változatlannak kell maradnia. Többek között annak a valószínűsége sem változhat meg, hogy egy részecskét x_j így másikat x_k adatokkal találunk a rendszerben, ezért teljesülnie kell a

$$|\psi(\ldots, x_j, \ldots, x_k, \ldots)|^2 = |\psi(\ldots, x_k, \ldots, x_j, \ldots)|^2 \tag{5.3.19}$$

egyenlőségnek a rendszer $\psi(x_1, \ldots, x_N)$ hullámfüggvényére. Ez azonban azt jelenti, hogy tetszőleges két részecske felcserélése esetén a hullámfüggvény legfeljebb egy egységnyi abszolut értékű komplex számmal szorzódhat:

$$\psi(\ldots, x_k, \ldots, x_j, \ldots) = e^{i\alpha}\psi(\ldots, x_j, \ldots, x_k, \ldots), \tag{5.3.20}$$

ahol $\alpha \in [0, 2\pi]$ valós szám. Ha most mégegyszer felcseréljük a két részecskét, akkor vissza kell kapjuk az eredeti hullámfüggvényt[60]. Ugyanazon két részecske újabb felcserélése azt jelenti, hogy a hullámfüggvény újabb $e^{i\alpha}$ fázisfaktorral szorzódik,

$$\begin{aligned} &\psi(\ldots, x_j, \ldots, x_k, \ldots) \\ &\quad = e^{i\alpha}\psi(\ldots, x_k, \ldots, x_j, \ldots) \\ &\quad = e^{2i\alpha}\psi(\ldots, x_j, \ldots, x_k, \ldots), \end{aligned} \tag{5.3.21}$$

ahonnan

$$e^{2i\alpha} = 1, \quad \Longrightarrow \quad e^{i\alpha} = \pm 1 \tag{5.3.22}$$

adódik. Ez pontosan azt jelenti, hogy a hullámfüggvény tetszőleges két részecske felcserélésével szemben vagy szimmetrikus, vagy antiszimmetrikus lehet.

Lehet másképpen is érvelni. Vegyük egyszerűség kedvéért a 2 darab, azonos részecskéből álló rendszer példáját. Legyen a rendszer Hamilton-operátora $\hat{H}$ és hullámfüggvénye $\psi(1, 2)$. Jelölje $\hat{P}_{1,2}$ a két részecske egymással történő felcserélésének operátorát. Akkor a 2 részecske felcserélésével kapott rendszer hullámfüggvénye

$$\psi'(1, 2) = \hat{P}_{1,2}\psi(1, 2) = \psi(2, 1). \tag{5.3.23}$$

Az 2 részecske ismételt felcserélésével visszaáll az eredeti állapot, azaz

$$\psi(1, 2) = \hat{P}_{1,2}\psi(2, 1) = \hat{P}_{1,2}\psi'(1, 2) = \hat{P}_{1,2}^2\psi(1, 2), \tag{5.3.24}$$

úgyhogy

$$\hat{P}_{1,2}^2 = \hat{1} \tag{5.3.25}$$

az egység-operátor. Mi lesz az 2 részecske felcserélésével kapott rendszer $\hat{H}'$ Hamilton-operátora? Nyilván az eredeti rendszerre és a 2 részecske felcserélésével kapott rendszerre is érvényes a Schrödinger-egyenlet:

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi(1, 2; t) &= \hat{H}\psi(1, 2; t), \\ i\hbar\partial_t\psi'(1, 2; t) &= \hat{H}'\psi'(1, 2; t). \end{aligned} \tag{5.3.26}$$

[60] Az alapfeltevésünk a kvantummechanikában, hogy a hullámfüggvény egyértékű függvényként létezik

Írjuk az utóbbit az alábbi alakba:

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t[\hat{P}_{1,2}\psi(1,2;t)] &= [\hat{P}_{1,2}]^2\hat{H}'[\hat{P}_{1,2}\psi(1,2;t)], \\ \hat{P}_{1,2}[i\hbar\partial_t\psi(1,2;t)] &= \hat{P}_{1,2}[(\hat{P}_{1,2}\hat{H}'\hat{P}_{1,2})\psi(1,2;t)] \end{aligned} \tag{5.3.27}$$

Hassunk az utóbbi egyenlet mindkét oldalára a $\hat{P}_{1,2}$ operátorral,

$$i\hbar\partial_t\psi(1,2;t) = (\hat{P}_{1,2}\hat{H}'\hat{P}_{1,2})\psi(1,2;t), \tag{5.3.28}$$

majd a kapott egyenletet hasonlítsuk össze a részecskék felcserélése előtti rendszerre vonatkozó Schrödinger-egyenlettel, és akkor leolvashatjuk , hogy

$$\hat{H} = \hat{P}_{1,2}\hat{H}'\hat{P}_{1,2}, \quad \hat{H}' = \hat{P}_{1,2}\hat{H}\hat{P}_{1,2}. \tag{5.3.29}$$

Ha a 2 részecske nem lenne azonos, akkor a részecskék felcserélésével kapott rendszerek fizikailag is különbözhetnének. Azonos részecskék esetében azonban a részecskék felcserélése ugyanazt a fizikai rendszert eredményezi és ugyanazt a fizikai állapotot:

$$\hat{H}' = \hat{P}_{1,2}\hat{H}\hat{P}_{1,2} = \hat{H}, \tag{5.3.30}$$

azaz

$$[\hat{H}, \hat{P}_{1,2}] = 0, \tag{5.3.31}$$

vagyis az azonos részecskékből álló két-részecskés fizikai rendszer Hamilton-operátora kommutál a részecskék felcserélésének operátorával. Ez azt jelenti, hogy az energia-sajátállapotok egyúttal a $\hat{P}_{1,2}$ operátor sajátállapotainak választhatók. Keressük meg a részecske-felcserélés $\hat{P}_{1,2}$ operátorának sajátértékeit, sajátfüggvényeit! Legyen $\psi(1,2)$ sajátfüggvény, akkor fennáll a

$$\hat{P}_{1,2}\psi(1,2) = \lambda\psi(1,2) \tag{5.3.32}$$

sajátérték-egyenlet. Ha ennek mindkét oldalára hatunk a $\hat{P}_{1,2}$ operátorral, akkor

$$\psi(1,2) = \hat{P}_{1,2}^2\psi(1,2) = \lambda\hat{P}_{1,2}\psi(1,2) = \lambda^2\psi(1,2) \tag{5.3.33}$$

egyenlőség adódik, ahonnan azt kapjuk, hogy $\lambda^2 = 1$, azaz a lehetséges sajátértékek:

$$\lambda = +1, \quad \lambda = -1. \tag{5.3.34}$$

A $\lambda = +1$ sajátértékhez tartozó sajátállapotokra a

$$\psi(2,1) = \hat{P}_{1,2}\psi(1,2) = +\psi(1,2) \tag{5.3.35}$$

tulajdonság teljesül, azaz ezek az állapotok szimmetrikusak a két részecske felcserélésével szemben. A $\lambda = -1$ sajátértékhez tartozó sajátállapotokra a

$$\psi(2,1) = \hat{P}_{1,2}\psi(1,2) = -\psi(1,2) \tag{5.3.36}$$

tulajdonság teljesül, azaz ezek az állapotok antiszimmetrikusak a két részecske felcserélésével szemben.

A fentiek azt kellene, hogy jelentsék, hogy két azonos részecskéből álló fizikai rendszer minden energia-szintje kétszeresen elfajult a részecskék felcserélésével szemben mutatott tulajdonság tekintetében, azaz tartozik hozzá egy szimmetrikus és egy antiszimmetrikus állapot. A Természet azonban **nem** valósítja meg ezt a fajta kettősséget! **A két azonos részecskéből álló rendszernek csak szimmetrikus állapotai vannak, ha a részecskék bozonok, és csak antiszimmetrikus állapotai vannak, ha a részecskék fermionok.**

Bozonok és fermionok. Mint arról már beszéltünk, **a Természetben a részecskéket két osztályba lehet sorolni aszerint, hogy milyen a spinjük. Az egész spinű, azaz az $s = 0, \hbar, 2\hbar, \ldots$ spinű részecskéket bozonoknak, a feles spinű, azaz az $s = \frac{1}{2}\hbar, \frac{3}{2}\hbar, \ldots$ spinű részecskéket fermionoknak nevezzük.** A kvantummechanika akkor ad az azonos részecskékből álló rendszerekre vonatkozóan a tapasztalattal egyező eredményeket, ha a lineáris szuperpozíció elve és a Heisenberg-féle határozatlansági elv mellett további **alapelvként elfogadjuk a részecskeazonosság elvét. Ez kimondja, hogy az azonos bozonok rendszerének hullámfüggvénye tetszőlegesen választott két részecske felcserélésével szemben szimmetrikus, az azonos fermionok rendszerének hullámfüggvénye pedig tetszőlegesen választott két részecske felcserélésével szemben antiszimmetrikus. Az azonos fermionokra vonatkozó utóbbi állítás a Pauli-elv legáltalánosabb megfogalmazása[61].**

A Pauli-elv más megfogalmazása. Vizsgáljuk azonos fermionok rendszerét. Tegyük fel, hogy az egy-részecskés állapotok $\mathcal{H}_i$ terében választunk egy ortonormált bázist, mondjuk a $\varphi_\nu(x_i)$ egy-részecskés állapotok teljes rendszerét. Az N részecskéből álló rendszer állapottere a $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_N$ tenzori szorzattér. Ebben egy teljes rendszert alkotnak az összes lehetséges $\varphi_{\nu_1}(x_1) \cdots \varphi_{\nu_N}(x_N)$ N-tényezős szorzatfüggvények. Mivel azonban a rendszer $\Psi(x_1, \ldots, x_N)$ hullámfüggvénye bármely két részecske felcserélésével szemben antiszimmetrikus, azért lineárisan kombinálható az összes lehetséges $\varphi_{\nu_1}(x_1) \cdots \varphi_{\nu_N}(x_N)$ szorzatok antiszimmetrizált kifejezéseiből, amelyek nem mások, mint az összes lehetséges

$$\begin{aligned}
\psi_{\nu_1,\ldots,\nu_N}(x_1, \ldots, x_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \varphi_{\nu_1}(x_1) & \varphi_{\nu_1}(x_2) & \cdots & \varphi_{\nu_1}(x_N) \\ \varphi_{\nu_2}(x_1) & \varphi_{\nu_2}(x_2) & \cdots & \varphi_{\nu_2}(x_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_{\nu_N}(x_1) & \varphi_{\nu_N}(x_2) & \cdots & \varphi_{\nu_N}(x_N) \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \varphi_{\nu_1}(P(1)) \varphi_{\nu_2}(P(2)) \cdots \varphi_{\nu_N}(P(N)) \qquad (5.3.37)
\end{aligned}$$

determinánsok, az ún. **Slater-determinánsok.** Itt $P(1), P(2), \ldots, P(N)$ jelenti az $1, 2, \ldots, N$ változók tetszőleges permutációját, $\sum_P$ pedig összegzést jelent az összes lehetséges permutációkra, továbbá $(-1)^P = +1$, ill. -1 aszerint, hogy a P permutaáció az $1, 2, \ldots, N$ változó sorrend páros, ill. páratlan permutációja.

Fontoljuk most meg, hogy hány darab részecskével lehet betöltve ugyanaz az egy-részecskés állapot. Ha egy Slater-determinánsban legalább két ν_i index megegyezik, akkor a determináns értéke azonosan nulla. Ez azt jelenti, hogy az N darab azonos fermionból álló rendszer állapota csak olyan részecske-konfigurációk lineáris szuperpozíciója lehet, amikor minden részecske más egy-részecske állapotban van.

[61] A Pauli-elv „legáltalánosabb megfogalmazása” alatt a Pauli-elv olyan megfogalmazását értjük, amelyik nem használja fel az egy-részecskés állapotok foglamát.

A Pauli-elv azt mondja ki[62], hogy azonos fermionok rendszerében bármely egy-részecskés állapot legfeljebb csak egy fermionnal lehet betöltve. Másszóval, két azonos fermion egy rendszeren belül nem tartózkodhat ugyan abban az egy-részecskés állapotban. Még másképpen úgy is fogalmazhatunk, hogy azonos fermionok rendszerében tetszőleges φ_ν egy-részecskés állapot vagy be van töltve egy részecskével, vagy nincsen betöltve, azaz a tetszőleges φ_ν egy-részecskés állapotban található részecskék száma, az n_ν betöltési szám csak 0 és 1 értékeket vehet fel: $n_\nu = 0$ vagy 1.

Azonos bozonok rendszerében nincsen hasonló megszorítás, bármely egy-részecskés állapotot akárhány, $n_\nu = 0, 1, 2, \ldots$ részecske is betölthet. Ha a $\nu_1, \nu_2, \ldots, \nu_r$ egy-részecskés állapotok rendre $n_{\nu_1}, n_{\nu_2}, \ldots, n_{\nu_r}$ darab azonos bozonnal vannak betöltve, akkor az $N = n_{\nu_1} + n_{\nu_2} + \ldots + n_{\nu_r}$ részecskés állapot hullámfüggvénye

$$
\begin{aligned}
&\psi_{n_{\nu_1}, n_{\nu_2}, \ldots, n_{\nu_r}}(1, 2, \ldots, N) \\
&= \sqrt{\frac{n_{\nu_1}! n_{\nu_2}! \cdots n_{\nu_r}!}{N!}} \sum_P \underbrace{\varphi_{\nu_1}(P(1))\varphi_{\nu_1}(P(2)) \cdots}_{n_{\nu_1}} \\
&\quad \times \underbrace{\varphi_{\nu_2}(P(n_{\nu_1}+1))\varphi_{\nu_2}(P(n_{\nu_1}+2)) \cdots}_{n_{\nu_2}} \underbrace{\varphi_{\nu_3}(P(n_{\nu_1}+n_{\nu_2}+1))\varphi_{\nu_3}(P(n_{\nu_1}+n_{\nu_2}+2)) \cdots}_{n_{\nu_3}} \\
&\quad \cdots \underbrace{\varphi_{\nu_r}(P(\sum_{r'=1}^{r-1} n_{\nu_{r'}}+1))\varphi_{\nu_r}(P(\sum_{r'=1}^{r-1} n_{\nu_{r'}}+2)) \cdots}_{n_{\nu_r}}
\end{aligned}
\tag{5.3.38}
$$

5.4. A részecskeazonosság néhány következménye

A részecskeazonosság elve tehát megköveteli, hogy az azonos részecskékből álló rendszer hullámfüggvénye fermionok esetén antiszimmetrikus, bozonok esetén szimmetrikus legyen bármely két részecske felcserélésével szemben. Ennek további következményei vannak, amelyek közül itt csak néhányat említünk.

1. *Az elektronok Coulomb-szórásának szórási amplitudója antiszimmetrikus az elektronok felcserélésével szemben.* Például vegyünk két elektront, amelyek hullámcsomagjai kezdetben elég jól lokalizáltak és amelyek csaknem jól definiált impulzussal indulnak el nagy távolságról egymás felé. A TKP rendszerben a két bejövő elektron impulzusának várható értéke azonos nagyságú és ellentétes irányú. Mondjuk az egyiket ,,balról", a másikat ,,jobbról" indítottuk el. Tegyük fel, hogy a két elektron között csak elektrosztatikus kölcsönhatás, azaz Coulomb-kölcsönhatás van, ami független a spintől és emiatt a kölcsönhatás

[62] A Pauli-elvnek ez a megfogalmazása az egy-részecskés állapotok fogalmára támaszkodik, ezért kevésbé általános, mint a hullámfüggvény antiszimmetrikusságát állító megfogalmazás.

szóródik a két elektron egymáson. Minden más kölcsönhatást elhanyagolunk. A kísérletet úgy végezzük, hogy az elektronok spinállapotát sem kezdetben sem a végállapotban nem figyeljük meg. Amikor az elektronok hullámcsomagjai a kölcsönhatást követően ismét messzire eltávolodnak egymástól, akkor újra két, lényegében szabadon repülő elektront fogunk látni, amelyek impulzusának várható értéke a TKP rendszerben azonos nagyságú, ellentétes irányú. Ez az irány azonban szöget zár be a bejövő elektronok irányával, amit eltérülési szögnek nevezünk. Legyen a bejövő részecskék iránya párhuzamos a z-tengellyel, a végállapotban elrepülő elektronok impulzusának iránya zárjon be θ, ill. $\pi-\theta$ szöget a z-tengellyel, és legyen φ a bejövő és a szórt elektronok impulzusai által kifeszített síknak, a szórási síknak az x-tengellyel bezárt szöge. Vegyük észre, hogy a θ és φ szögek éppen a 2 elektron $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ relatív helyzetvektorának gömbi polárkoordinátái.

Az elektronok megkülönböztethetetlensége miatt azt nem tudjuk semmilyen módon eldönteni, hogy a végállapotban melyik az az elektron, amelyik ,,balról" és melyik, amelyik ,,jobbról" indult el eredetileg. Ezért a (θ, φ) és a $(\pi-\theta, \varphi+\pi)$ irányokba történő szóródás differenciális hatáskeresztmetszetének meg kell egyeznie, hiszen a két elektron felcserélése a végállapotban annak felel meg, hogy a relatív helyzetvektor előjelet vált, ill. hogy a (θ, φ) irányba szóródó elektron felcserélődik a $(\pi - \theta, \pi + \varphi)$ irányba szóródó elektronnal. A z-tengely körüli forgásszimmetria miatt azonban a szórási sík minden irányítása egyenlően valószínű, úgyhogy a differenciális szórási hatáskeresztmetszet csak a θ szögtől függ. A differenciális szórási hatáskeresztmetszet tehát azonos kell legyen a θ és a $\pi - \theta$ eltérülési szög esetén. A differenciális szórási hatáskeresztmetszet viszont a megfelelő szórási amplitudó abszolut értékének a négyzete, $\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$. Ezért az $f(\theta)$ és az $f(\pi-\theta)$ szórási amplitudó csak egy egységnyi abszolut értékű komplex fázisban különbözhet egymástól:

$$f(\pi - \theta) = e^{i\alpha} f(\theta), \tag{5.4.39}$$

ahol $\alpha \in [0, 2\pi]$ valós. Ráadásul, ha a két elektront felcseréljük, majd újra felcseréljük, akkor vissza kell kapjuk az eredeti $f(\theta)$ amplitudót. Ezért $e^{2i\alpha} = 1$ kell teljesüljön, ahonnan a keresett fázisfaktor szóba jöhető értékei: $e^{i\alpha} = \pm 1$. Ez másképpen azt jelenti, hogy a szórási amplitudó vagy szimmetrikus, vagy antiszimmetrikus lehet a két elektron felcserélésével szemben. Tudjuk azonban azt is, hogy a szórási amplitudót ha megszorozzuk az $\frac{1}{r}e^{ikr}$ gömbhullámmal ($r = |\vec{r}|$ és $k\hbar$ a berepülő, ill. a rugalmas szórás után kirepülő elektronok impulzusának nagysága), akkor a szórt részecskék relatív mozgásának hullámfüggvényét kapjuk. Ennek a Pauli-elv miatt antiszimmetrikusnak kell lennie a két elektron felcserélésével szemben, amiből következik, hogy az $e-e$ szórási amplitudónak is antiszimmetrikusnak kell lennie.

Képzeljük el, hogy $f_{\mathrm{d}}(\theta)$, annak a ,,direkt" folyamatnak az amplitudója, amikor az 1-es elektron szóródik θ szöggel, és ezért észlel a θ szög alatt elhelyezett

detektor elektront. **Ez a direkt folyamat azonban nem különböztethető meg attól a folyamattól, amelyben a két elektron kicserélődik és a 2-es elektront észleli a θ szög alatt elhelyezett detektor.** Az utóbbi folyamat amplitudója $f_{\mathrm{k.cs.}}(\theta) = f_{\mathrm{d}}(\pi - \theta)$. A fentebb elmondottak alapján **a két amplitudó interferál** és interferenciájukra elvileg csak kétféle lehetőség van: $f(\theta) \propto f_{\mathrm{d}}(\theta) \pm f_{\mathrm{d}}(\pi - \theta)$, amelyek közül a Pauli-elv az antiszimmetrikus lehetőséget követeli meg. **Az elektronok Coulomb-szórása esetén a szórási amplitudó a két elektron felcserélésével szemben antiszimmetrikus:**

$$f(\theta) \propto f_{\mathrm{d}}(\theta) - f_{\mathrm{d}}(\pi - \theta). \tag{5.4.40}$$

Az antiszimmetrizálás eredménye abban mutatkozik meg, hogy az elektron elektronon történő Coulomb-szórásának differenciális hatáskeresztmetszete különbözik a klasszikus mechanikai úton számolt Rutherford-féle szórási hatáskeresztmetszetszettől. A hatáskeresztmetszet mindkét esetben szimmetrikus, $\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{d\sigma(\pi-\theta)}{d\Omega}$. Amíg azonban a Rutherford-féle szórási hatáskeresztmetszet szigorúan monoton csökken a $\theta \in [0, \frac{1}{2}\pi]$ intervallumban, nem zérus értékű minimuma van $\theta = \pi/2$ esetén és szigorúan monoton nő a $\theta \in [\pi/2, \pi]$ intervallumban, addig a kvantummechanikai differenciális hatáskeresztmetszet értéke a $\theta = \pi/2$ minimumban zérus, és a direkt és kicserélődési amplitudó interferenciája miatt további mellékmaximumokkal és -minimumokkal rendelkezik.

Azonos bozonok esetén a szórási amplitudó a direkt és a kicserélődési folyamat amplitudóinak az összege. A két folyamat interferenciájának az eredményeként a differenciális szórási hatáskeresztmetszet a $\theta = \pi/2$ irányban nagyobb, mint megkülönböztethető részecskék esetén lenne, és most is jelentkeznek a mellékmaximumok és -minimumok.

2. A kölcsön nem ható azonos részecskék rendszerének alapállapota lényegesen különbözik aszerint, hogy fermionok vagy bozonok alkotják a rendszert. Kölcsön nem ható, azonos fermionok rendszerében az alapállapotot a Pauli-elv és az energia-minimum elvének figyelembe vételével úgy kaphatjuk meg, hogy a fermionokkal elkezdjük benépesíteni egyesével, növekvő energiájuk sorrendjében az egy-részecskés állapotokat. Ha a fermion-rendszer valamennyi, N darab részecskéjét ilymódon elhelyeztük a megfelelő egy-részecskés állapotokban, akkor egy bizonyos energiaszintig, az ϵ_F Fermi-energiáig minden egy-részecskés állapot egyszeresen be lesz töltve, míg a Fermi-szint fölött minden egy-részecskés állapot betöltetlen marad. Az alapállapot hullámfüggvényét olyan Slater-determináns írja le, amely a Fermi-szint alatti öszes, betöltött egy-részecskés állapot hullámfüggvényének N-tényezős szorzatából antiszimmetrizálással áll elő.

   A kölcsön nem ható, azonos bozonok rendszerében az alapállapotot az jellemzi, hogy minden egyes bozon ugyanazt az egy-részecskés alapállapotot tölti be.

Az egy-részecskés alapállapot betöltési száma megegyezik a teljes N részecskeszámmal, az egy-részecskés gerjesztett állapotok betöltési száma zérus.

3. Egy másik fontos következmény az, hogy amennyiben egy egy-részecskés állapot be van töltve, akkor ez a tény befolyásolja azt, hogy milyen valószínűséggel kerülhet további részecske ugyanebbe az állapotba[63].

   Az azonos fermionok rendszerében a Pauli-elv megtiltja, hogy két részecske ugyanabba az egy-részecskés állapotba kerüljön.

   Azonos bozonok rendszerében a következő furcsaság jelentkezik. Legyen w annak a valószínűsége, hogy egy betöltetlen egy-részecskés állapot betöltődik. Tegyük fel, hogy már n darab bozon van ebben az állapotban. Ekkor annak a valószínűsége, hogy egy további bozon kerül ebbe az állapotba, $(n+1)w$. Azt szokás mondani, hogy az állapot spontán betöltődésének w valószínűségéhez hozzáadódik annak a ,,stimulált" (serkentett) folyamatnak az nw valószínűsége, amit az a tény vált ki, hogy az adott egy-részecskés állapotban már van n darab részecske. A bozonok annál inkább ,,szeretnek" egy adott állapotba kerülni, minél több részecske van már ebben az állapotban.

   A bozonállapotok betöltési számainak fenti tulajdonsága teszi lehetővé a mézer és a lézer működését, és ugyancsak jelentős szerepe van a sugárzás és az anyag közti termikus egyensúly kialakulásában.

4. További nagy horderejű következmény a **spin-statisztika tétel. A spin-statisztika tétel kimondja, hogy az egymással kölcsön nem ható, azonos fermionok rendszerében a Fermi-Dirac-statisztika, a kölcsön nem ható, azonos bozonok rendszerében a Bose-Einstein-statisztika érvényes.** Jelölje n_α az egymással kölcsön nem ható, azonos részecskék T hőmérsékletű rendszerében azt az átlagos betöltési számot, amivel az ϵ_α energiájú φ_α egy-részecskés állapot be van töltve. (Egyszerűség kedvéért helyezkedjen el a rendszer V térfogatban, akkor az egy-részecskés állapotok α indexe, azaz az egy-részecskés állapotokat kvantumszámok diszkrétek.) Jelölje $\alpha = 0$ az egy-részecskés alapállapotot. **A Fermi-Dirac statisztika esetén**

$$n_\alpha = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_\alpha - \mu}{k_B T}} + 1}, \tag{5.4.41}$$

   a Bose-Einstein statisztika esetén pedig

$$n_\alpha = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_\alpha - \mu}{k_B T}} - 1}, \tag{5.4.42}$$

[63] Az alábbiak bizonyítása meghaladja ennek az előadásnak a kereteit. A későbbi kvantummechanikai tanulmányok során, az úgynevezett második kvantálás kapcsán fogjuk ezt tárgyalni.

ahol μ a kémiai potenciál, ami a hőmérséklet függvénye, k_B pedig a Boltzmann-állandó.

Abszolut zérus hőmérsékleten az elektronok kémiai potenciálja a Fermi-energia, $\mu(T=0)=\epsilon_F$. A Fermi-Dirac-statisztika azt jelenti, hogy abszolut zérus fokon a rendszer kvantummechanikai alapállapota valósul meg, a Fermi-szint alatt minden egy-részecsés állapot egyszeresen be van töltve, a Fermi-szint fölött minden egy-részecskés állapot betöltetlen. Ha a hőmérséklet $T>0$, akkor a Fermi-szint alatt pontosan annyi betöltetlen állapot jelenik meg, mint ahány állapot betöltődik a Fermi-szint fölött. Az alapállapotra jellemző eloszlás ,,fellazulása" a Fermi-szint körüli kb. k_BT szélességű energiasávban történik meg.

Bozonok esetére példaként a fotonok rendszere szolgálhat. Ekkor a kémiai potenciál $\mu=0$. A fotonoknak nincsen nyugalmi tömege, töltése, stb., amire megmaradási törvény vonatkozna, így a fotonok száma nem megmaradó egy V térfogatú, az edény falával termikus egyensúlyban levő elektromágneses sugárzásban. A T hőmérséklet csökkenése esetén a Bose-Einstein-eloszlásnak megfelelően egyre inkább az alapállapot töltődik be fotonokkal, miközben a gerjesztett állapotok fokozatosan kiürülnek. Ha az azonos bozonok nem zérus nyugalmi tömegű részecskék, pl. $S=0$ triplet-állapotú He-atomok, akkor az N részecske szám megmaradó mennyiség, a kémiai potenciál nem zérus, de ahogy a hőmérséklet egy kritikus T_0 érték alá csökken, akkor nullává válik. A gerjesztett egy-részecskés állapotok a Bose-Einstein-statisztika szerint vannak betöltve. Amíg $T>T_0$, addig az alapállapot átlagos betöltési száma zérus. Amikor azonban a hőmérséklet a T_0 kritikus érték alá csökken, akkor az alapállapotot nem nulla számú atom kezdi benépesíteni. A hőmérséklet további csökkentésével egyre jobban kiürülnek a gerjesztett egy-részecskés állapotok és a korábban gerjesztett állapotban volt részecskék közül egyre több kerül alapállapotba, Végül abszolút zérus hőmérsékleten mind az N darab atom az alapállapotba kerül. Azt a jelenséget, hogy alacsony hőmérsékleten a bozonok ugyanazt az alapállapotot kezdik benépesíteni, Bose-kondenzációnak nevezik. A T_0 hőmérséklet a Bose-kondenzáció megindulásának hőmérséklete. Nagyságrendileg a k_BT_0 termikus gerjesztési energia összemérhető annak a zérusponti rezgésnek az ϵ_0 energiájával, amivel egy V/N átlagos térfogatban elhelyezkedő atom rendelkezik,

$$k_BT_0 \sim \epsilon_0 \sim \left(\hbar\frac{2\pi}{L/2}\right)^2/2m \sim \frac{8\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \sim \frac{8\pi^2\hbar^2}{2m}(N/V)^{2/3} \tag{5.4.43}$$

ahol felhasználtuk, hogy egy atom számára rendelkezésre álló térfogat lineáris mérete $L\sim(V/N)^{1/3}$. Itt N/V az atomok részecskeszám-sűrűsége.

5.5. A lézer*

Mielőtt a lézer működési elvére rátérnénk, el kell mondani, hogy Einstein már 1917-ben megmutatta, hogy az atomi rendszerek háromféle sugárzási folyamatban tudnak résztvenni:

1. **abszorpció,** amikor az atom energiát vesz fel a sugárzási térből,
2. **spontán (önkéntelen, magától bekövetkező) emisszió,** amikor az atom külső behatás nélkül bocsát ki sugárzást,
3. **stimulált (serkentett) emisszió,** amikor az atomot a külső sugárzási tér készteti sugárzás kibocsátására.

Az elektromágneses sugárzás fotonokból áll. A fotonok $1\hbar$ spinnel rendelkező, zéris nyugalmi tömegű részecskék. Legyen adott atomi átmenet során egy $\vec{k}$ impulzusú foton kibocsátásának valószínűsége w. Ha az atom környezetében már van jelen n darab ugyanilyen foton, akkor $(n+1)w$ annak a valószínűsége, hogy újabb ugyanilyen $\vec{k}$ impulzusú foton kerül kibocsátásra stimulált emisszió révén. Ebben mutatkozik meg az, hogy **a fotonok bozonok és az azonos bozonok „jobban szeretik" azt az állapotot benépesíteni, amely már nem teljesen üres, mint az üres állapotot.**

A lézer működési elve a következő. Tegyük fel, hogy a lézert olyan közegben valósítjuk meg, amelynek atomjai két gerjesztett állapottal rendelkeznek. Legyen az atomok alapállapota E_0 energiájú, E_1 és E_2 meg két gerjesztett állapot energiája, amelyekre $E_0 < E_1 < E_2$. Tegyük fel továbbá, hogy a E_2 energiájú állapot viszonylag hosszú élettartamú. Gerjesszük valamilyen módszerrel az atomokat, hogy azok többsége az E_2 energiájú gerjesztett állapotba kerüljön. Ez lehetséges gázlézerben termikus gerjesztés révén, vagy szilárdtestlézerben $\Omega = (E_2 - E_0)/\hbar$ frekvenciájú gerjesztő fénnyel történő besugárzással. Némi ügyességgel elérhető, hogy így létrejöjjön az úgynevezett **inverz populáció,** amikor több atom tölti be az E_2 energiájú gerjesztett állapotot, mint az E_0 energiájú alapállapotot. Ez pontosan a fordítottja annak a betöltésnek, ami T hőmérsékleten eredetileg megvalósul, amikoris az alapállapot van jobban betöltve és a gerjesztett állapot kevésbé[64]. Ez tehát az állapotok fordított benépesítése, azaz inverz populációja.

Miután létrehoztuk az inverz populációt, valamelyik atom spontán módon emittál egy $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$ frekvenciájú fotont és történik egy átmenet az E_2 energiájú állapotból az E_1 energiájú állapotba. A lézerközeget tartalmazó edény két átellenes falán párhuzamos tükrök helyezkednek el, amelyek sokszor visszaverik oda-vissza a kibocsátott fényt. Ha sikerül a spontán emittált fotont így benntartani a közegben, akkor annak az impulzusa merőleges a tükrökre. Ettől kezdve kétszeresre nő annak a valószín H usége, hogy újra ilyen foton fog emittálódni amikor a következő gerjesztett atom emittál, mert jelentkezik a **stimulált emisszió.** A lézer két végén elhelyezett tükörrel tudjuk biztosítani, hogy csak a tükörre merőleges impulzusú fotonok tudnak a rendszerben maradni. Így a további spontán emisszíók fotonjai általában eltávoznak és a rendszerben összegyűlnek a további atomok stimulált emisszíójából származó, azonos fotonok. Rövidesen tehát **makroszkopikus számú azonso foton jelenik meg, amelyek hullámfüggvényei a stimulált emisszió miatt azonos fázisban vannak és így szuperponálódnak egymásra.** Végeredményben tehát makroszkopikusan mérhető intenzitású, koherens sugárzás, lézerfény jelenik meg. **A sugárzás koherenciája a lézernek, mint sugárforrásnak a legfontosabb előnye a hagyományos fényforrásokkal szemben.** Az atomok a lézerfoton kibocsátása után az $E_1 - E_0$ energia spontán kibocsátása révén visszakerülnek az alapállapotba. Az inverz populáció tehát a

[64] Ha N_0, ill. N_2 rendre az alap-, ill. a gerjesztett állapotban található atomok száma és T a lézer közegének hőmérséklete, akkor $N_2 = N_0 \exp\left(-\frac{E_2-E_0}{k_B T}\right)$, ahol k_B a Boltzmann-állandó.

lézer folyamatos működése érdekében folyamatos gerjesztéssel fenn kell tartani. A lézerfény további előnye, hogy nagyon monokromatikussá és nagyon párhuzamossá tehető. Utóbbi azt jelenti, hogy nagyon kicsi a lézernyalábot alkotó lézersugarak széttartási szöge.

A lézerekre alapozva az atomok spektroszkópiai vizsgálatában egy új módszer fejlődött ki, a **lézerspektroszkópia**[65]**,** azaz az atomoknak lézerfény segítségével történő vizsgálata. A fény abszorpcióját és spontán emisszióját már a hagyományos atomi spektroszkópia is hasznosította, ezen alapult az atomi energiaszintek vizsgálata. Sokáig nem sikerült azonban a gyakorlatban hasznosítani a stimulált emissziót. Az 1950-es években amerikai és szovjet tudósok egyaránt megpróbálták hasznosítani az atomi rendszerek stimulált emisszióját abból a célból, hogy gyenge mikrohullámú jeleket erősítsenek fel és mikrohullámú oszcillátort működtessenek. Ekkor fejlesztették ki a **mézert**[66]**.** Shawlownak, Townesnak és Prokhorovnak úttörő szerepe volt a mézer-elv infravörös és optikai tartományra történő kiterjesztésében. Ez vezetett a lézer-elvhez[67]. Az első működő lézert 1960-ban építették. Azóta lézerek működnek az egész látható tartományban és az infravörös meg az ultraibolya tartomány egy-egy részében is. A lézer csaknem ideális eszközzé vált az atomok és a molekulák tulajdonságainak spektroszkópiai tanulmányozása terén. Ebből a célból számos spektroszkópiai módszert dolgoztak ki. A lézerspektroszkópiai módszerek közül nem egy az anyagok nem lineáris optikai viselkedésén alapul, kihasználva, hogy a lézerfény inmtenzitása olyan nagy lehet, hogy a lineáris anyagi összefüggések érvényüket vesztik a közegben.

5.6. Atomok Mengyelejev-féle periodusos rendszere

Az elemeket Mengyelejev (1869) kémiai tulajdonságaik alapján, empírikus úton rendezte, ez **az elemek periódusos rendszere**. Az elnevezés onnan ered, hogy az elemeket növekvő rendszámuk szerint sorba rendezve bizonyos tulajdonságaikban, mint pl. vegyérték, ionizációs energia, stb. periodikusság figyelhető meg. Niels Bohr (1922) jött rá, hogy az elemek periódusos rendszerének az értelmezéséhez az atomi elektronhéjak betöltődésének sajátságait kell megvizsgálni. A kvantummechanika egyik látványos sikere az elemek periódusos rendszerének a magyarázata az atomok szerkezetének alapján.

Az atomok alapállapotban elektromosan semlegesek. Ha az atom rendszáma Z (a protonok száma az atommagban), akkor az atom középpontjában elhelyezkedő, pontszerűnek tekinthető atommag $+Z|e|$ töltést hordoz. Ugyanakkor

[65]Nicolaas Bloembergen (1920-, holland) és Arthur Leonard Shawlow (1921-1999, amerikai) egynegyed-egynegyed arányban részesültek az 1981. évi fizikai Nobel-díjban a lézerspektroszkópia kifejlesztése terén végzett munkásságukért. A díj második felét Kai M.B. Siegbahnnak (1918-, svéd) ítélték oda a nagy feloldóképességű elektronspektroszkópia kifejlesztésében végzett munkásságáért.

[66]„Micowave Amplification by Stimulated Emission of Radiation" első betűiből képezett betűszó, jelentése mikrohullám erősítése sugárás stimulált emissziója révén. Az 1964. évi fizikai Nobel-díjban fele-részben Charles H. Townes (1915-, amerikai) részesült a kvantumelektronika területén végzett alapvető munkásságáért, amely a mézer-lézer elven működő erősítők és oszcillátorok kifejlesztéséhez vezetett. A díj másik felében egyenlő arányban Nikolai Gennadievich Basov (1922-2001, orosz) és Alexander Mikhail Prokhorov (1916-2002,orosz) részesültek azokért az alapozó kísérleti fizikai kutatásaikért, amelyek a mézer és a lézer felfedezéséhez vezettek.

[67]A lézer a „Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation" kezdőbetűiből alkotott betűszó, jelentése fényerősítés sugárzás stimulált emisszíója révén.

a Z rendszámú atomban alapállapotban Z darab elektron van, amelyek összesen $-Z|e|$ töltést hordoznak. Az alapállapotú atomok felépülésében a Pauli-elv és az energiaminimum elve érvényesül.**Az atomok stabil alapállapotának olyan az elektron-szerkezete, ami eleget tesz a Pauli-elvnek és amihez a legkisebb energia tartozik.**

Olyan inerciarendszerben, amelyben az atom TKP-ja nyugalomban van, az atom Hamilton-operátora:

$$\hat{H} = \sum_{a=1}^{Z}\left[-\frac{\hbar^2\Delta_{\vec{r}_a}}{2m_e} - \frac{Ze^2}{|\vec{r}_a|}\right] + \frac{1}{2}\sum_{a,b=1}^{Z}\frac{e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_b|}, \tag{5.6.44}$$

ahol az első tag az egyes elektronok kinetikus energiáinak és az atommag Coulomb-terében felvett potenciális energiáinak az összege, a második tag pedig az elektronok közötti Coulomb-kölcsönhatásnak az energiája[68]. Rögzített Z rendszám esetén az atom alapállapotának megkeresése tehát azt jelenti, hogy meg kell határozni azt az antiszimmetrikus hullámfüggvényt, amely az atom Hamilton-operátorának legkisebb energia-sajátértékéhez tartozik. A feladatot az elektronok közötti kölcsönhatás teszi bonyolulttá. Ezért a feladatot, a H-atom, ill. a H-szerű atomok (ionok) esetét kivéve, nem lehet közelítések nélkül megoldani. A jelen előadás keretében nem vállakozhatunk a különböző közelítő módszerek vázolására sem.

Az elemek periódusos rendszerének kvalitatív magyarázatában az a tény van segítségünkre, hogy az elektronok közötti Coulomb-taszítás jelentős része úgy vehető figyelembe, mint a többi elektron által egy kiszemelt elektron számára létrehozott átlagos, centrális potenciál. Ezután az elektronok közötti taszító Coulomb-kölcsönhatásnak az a része, amelyik nem olvasztható bele az átlagos potenciálba, már csak gyenge, ún. maradék-kölcsönhatás. Ha a maradék-kölcsönhatást elhanyagoljuk, akkor a centrális potenciálban szokásos n fő- és ℓ mellékkvantumszámokkal jellemzett (n, ℓ) egy-elektron állapotokról beszélhetünk. Ezek elnevezése most is $1s$, $2s$, $2p$, stb. elektron-pályák, mint a H-atom esetén. Az egyes pályákhoz, az elektron spin-vetületének kétféle beállását is figyelembe véve, $2(2\ell + 1)$ darab elektron-állapot tartozik tartozik. A lényeges különbség az, hogy most az egyes elektron-pályák energiáját nem lehet általában olyan egyszerű képlettel kiszámolni, mint a H-atom esetén. Ezért az elektron-állapotok energiái nem szigorúan monoton változnak a növekvő n és ℓ kvantumszámokkal.

Az elemek periódusos rendszerében a rendszám 1-gyel történő növekedése 1 darab további elektron beépülését jelenti az atomba. Ez mindig úgy történik, hogy a következő elektron a még be nem töltött, energia szerint legalacsonyabban fekvő állapotok valamelyikébe kerül. Ilyen módon a periódusos rendszer elemei növekvő

[68] Azzal a közelítéssel éltünk, hogy az atom tömegközéppontja és az atommag egybe esik, és ezt a pontot választottuk a koordinátarendszerünk origójának. egyúttal a Coulomb-kölcsönhatáson kívül minden más kölcsönhatást elhanyagolunk.

rendszám szerint haladva, csoportokat alkotnak. Az egyes csoportokban rendre az alábbi pályák állapotai töltődnek fel:

Eletron-héj	Állapotok száma
$1s$	2
$2s$, $2p$	8
$3s$, $3p$	8
$4s$, $3d$, $4p$	18
$5s$, $4d$, $5p$	18
$6s$, $4f$, $5d$, $6p$	32
$7s$, $6d$, $5f$ ...	

A táblázatban feltüntetett pálya-csoportokat azért nevezzük elektronhéjaknak, mert amikor egy-egy ilyen csoport pályái teljesen betöltődnek, akkor az utolsó elektron kötési energiájának (az atom ionizációs energiájának) maximuma van, amikor megindul a következő héj betöltődése az eggyel nagyobb főkvantumszámú s-pályával, akkor az ionizációs energiának minimuma van, azaz a zárt héjú atomhoz hozzáadott további elektron nagyon gyengén kötött.

Az elemek első csoportjában a hidrogén és a hélium található (a periódusos rendszer első sora), a második és a harmadik héj feltöltődése révén két (kis), egyenként 8-8 elemet tartalmazó periodus jön létre. Ezt követi két nagy, 18-18 elemet tartalmazó periódus és a 32 elemet tartalmazó periódus, amelyhez tartoznak a ritka földfémek is. Végül az utolsó csoport a Természetben létező elemek között nem zárul le.

5.7. Ideális gázok alacsony hőmérsékleten*

Az ideális gáz sok valóságos fizikai rendszernek jó közelítő modellje. A ritka gázok el§ho közelítésbenideális gázként viselkednek, csak növekvő sűrűséggel jelentkeznek bennük a részecskék kölcsönhatása miatti eltérések az ideális viselkedéstől. A fémekben a vezetési elektronok szintén jóközelítéssel ideális gázt alkotnak, ideális fermi-gázt, mert a feles spinű elektronok fermionok. A szilárdtestek kvantált

rácsrezgései úgy tekinthetők, mint ideális bozon-gáz, fononok gáza. A hőmérsékleti sugárzás ugyancsak ideális bozon-gáz, fotonok gáza. ezek azok a kísérletileg is vizsgálható fontosabb esetek, amikor **a kvantummechanika makroszkopikus méretekben történő jelentkezésének lehetünk a tanúi. Az adot makroszkopikus test makroszkopikus jellemzői közötti termodinamikai összefüggések alakja módosul a kvantummechanika miatt ahhoz képest, mint amilyen összefüggéseket a klasszikus fizika alapján várnánk. A klasszikus fizika alapján várttól eltérő viselkedés ezekben az esetekben végső soron a részecskeazonosság kvantummechanikai következményének tulajdonítható.**

A **ritka gázok alacsony hőmérsékleten** másképpen viselkednek aszerint, hogy a gázrészecskék bozonok vagy fermionok. **A hőmérsékleti sugárzás** vizsgálata a kvantummechanika alapjainak lefektetése során is rendkívül fontos szerepet játszott, mint a klasszikus fizika törvényei alapján meg nem érthető jelenség (ld. az A.1 függeléket). Ugyanígy **a szilárdtestek fajhőjének alacsony hőmérsékleten mutatott hőmérséklet-függését** sem lehet a kvantummechanika, az ideális fonongáz tulajdonságainak ismerete nélkül megérteni (ld. az A.1 függeléket). **A fémek vezetési tulajdonságainak, a fotoeffektus során szerepet játszó kilépési munkának, stb.** a megértése szempontjából megintcsak döntő az ideális elektrongáz kvantummechanikai alapon történő tárgyalása (ld. az A.1 függeléket) .

Az ideális gázon olyan fizikai rendszert értünk, amelyet az alábbi tulajdonságok jellemeznek:

1. a gáz részecskéi nem hatnak kölcsön egymással,
2. a részecskerendszert az tartja össze, hogy a részecskék egy V térfoagtú edény falai közt végezhetnek „szabad” mozgást,
3. a gáz részecskéi az edény falának részecskéivel ütközve véletlenszerűen vehetnek fel, ill. adhatnak le energiát, amelynek révén a gáz az edény T hőmérsékletű falával termikus egyensúlyba kerül[69].

Az ideális gáz viselkedésére jellemzők a makroszkopikus jellemzői közötti összefüggések. Ezek elméleti értelmezéséel, - itt nem részletezhető módon – a statisztikus fizika és a termodinamika foglalkozik. Ilyen összefüggések pl. a p nyomás, mint a gáz T hőmérsékletének és $n = N/V$ részecskesűrűségének a függvénye egyensúlyi állapotban (N a gáz részecskéinek száma, V a gáz térfogata), vagy a gáz U energiája (belső energiája), mint T, n és V függvénye, stb. Meg lehet mutatni, hogy minden (nem zérus nyugalmi tömegű, belső szerkezet nélküli, azonos részecskékből álló) ideális gáz elég magas hőmérsékleten

$$\frac{U}{V} = \frac{3}{2} n k_B T, \quad p = n k_B T \tag{5.7.45}$$

törvényszerűségeket mutat, ahol k_B a Boltzmann-állandó. Ez a viselkedés akkor lenne érvényes tetszőleges hőmérséklet esetén, ha a gáz részecskéi klasszikus mechanikai objektumok lennének, amelyek nem engedelmeskednek a kvantummechanika törvényeinek.

Valójában azonban a részecskék a kvantummechanika törvényeinek engedelmeskednek. Ez alacsony hőmérsékleten észre is vehető. Ha a gáz hőmérséklete olyan alacsony, hogy $k_B T \lesssim \epsilon_0$, ahol ϵ_0 a V/N térfogatba kényszerített részecske alapállapoti energiája, akkor az ideális gáz makroszkopikus jellemzői közötti termodinamikai össszefüggések megváltoznak. Ilyenkor a részecskék zérusponti kvantumfluktuációinak ϵ_0 energiája össszemérhető a termikus gerjesztések $k_B T$ átlagos

[69] Termikus egyensúlyról akkor beszélünk, ha a gáz részecskéinek a fal részecskéivel történő egyedi ütközései révén időegység alatt átlagosan ugyanannyi energiát ad le a falnak, mint amennyit felvesz tőle.

energiájával, vagy annál jelentősebb. Ezért a kvantumfluktuációk következtében a makroszkopikus jellemzők közti törvényszerűségek megváltoznak. A kvantumeffektusok következtében a feles spinű fermionok gáza, és az egész spinű bozonok gáza alacsony hőmérsékleten nemcsak a klasszikus ideális gázétól eltérő viselkedést mutat, hanem egymásétól is. A fermionok gáza esetében a Pauli-elv a fermionok között hasonóan jelentkezik, mint valamiféle taszítás, és ezért sem a gáz belső energiája, sem a gáz nyomása nem tűnik el zérus hőmérsékleten, hanem véges pozitív értékhez tartanak. Ugyanakkor a bozonok ideális gáza esetében mind a belső energia, mind a nyomás a hőmérsékletnek T^α hatványfüggvénye szerint nullához tart, ahol $\alpha > 1$, ellentétben a klasszikus ideális gázzal, amikor a kitevő $\alpha = 1$ lenne. A belső energia és a nyomás tehát a klasszikus fizika alapján előrejelzett lineáris hőmérséklet-függésnél gyorsabban tart nullához, ha a hőmérséklet zérushoz tart.

Az elmondottakat a tapasztalat megerősíti. A megfigyelt törvényszerűségek értelmezése a kvantummechanika, a statisztikus fizika és a termodinamika törvényeinek egyidejű figyelembe vételével lehetséges. Az ideális gázok alacsony hőmérsékleten mutatott termodinamikai viselkedése szép példája annak, hogy a kvantummechanika a makroszkopikus testek makroszkopikus jellemzői közötti törvényszerűségekbe is észrevehetően „beleszólhat”.

5.8. Bose-kondenzátumok interferenciája*

A Bose-Einstein-kondenzáció jelensége, mint erről már szóltunk, abban áll, hogy egész spinű és valamilyen megmaradó tulajdonsággal (pl. részecskeszámmal, töltéssel) rendelkező, azonos részecskék ideális gázában elég alacsony hőmérsékleten, a korábban említett Bose-kondenzáció T_0 hőmérséklete alatt minden részecske igyekszik ugyanazt az egy-részecskés kvantumállapotot, a legkisebb energiájú alapállapotot betölteni.

A feketetest sugárzás Planck-féle törvényét Bose[70] vezette le először 1924-ben azon az alapon, hogy a sugárzást azonos részecskékből (fotonokból) álló gáznak tekintette. Az ő megfontolásait általánosította Einstein olyan atomok vagy molekulák ideális gázára, amelyekben a részecskeszám megmaradó, és még ugyan abban az évben megmutatta, hogy elég alacsony hőmérsékleten be kell következnie a kondenzációnak. Az elméleti megfontolásokból nyilvánvaló, hogy csak az egész spinű részecskék, a bozonok kondenzálódnak. Azok is csak akkor, ha van valamilyen megmaradó tulajdonságuk, mint pl. a részecskeszám.

Hosszú évtizedeken át folytak kísérletek a Bose-Einstein-kondenzátum laboratóriumi megvalósítására zérus, pontosabban csaknem zérus abszolút hőmérsékleten. Cornell, Wieman[71] és munkatársai hozták létre az első kondenzátumot rubidium atomok ultrahideg gázában. Később még ugyan ebben az évben Ketterle és munkatársai az MIT-ban nátrium-atomok gázában valósították meg a kondenzátumot. Ettől kezdve robbanásszerűen nőtt meg az érdeklődés a kondenzátumok tulajdonságainak vizsgálata iránt. Az egyik legérdekesebb tulajdonság, hogy a kondenzátum egy koherens állapotú, sok atomból felépülő anyagdarab, amelyet egyetlen, jól definiált fázissal rendelkező hullámfüggvény ír le[72]. A koherencia közvetlen kísérleti ellenőrzése megtörtént. Két egymás melletti mágneses csapdában hoztak létre kondenzátumokat, majd megszüntették közöttük

[70]Satyendra Nath Bose (1892-1974, indiai) fizikus, a kvantumstatisztika egyik szellemi atyja, akinek nevét viselik a bozonok és a Bose-Einstein-statisztika. Meghnad Sahaval közös munkájuk eredménye a gázok Saha-Bose-féle állapotegyenlete.

[71]A 2001. évi fizikai Nobel-díjat megosztva kapták Eric A. Cornell (1961-), Wolfgang Ketterle (1957-) és Carl E. Wieman (1951-) alkáli atomok híg gázában a Bose-Einstein-kondenzáció megvalósításáért és azokért a kezdeti, alapvető fontosságú vizsgálatokért, amelyek során a kondenzátumok tulajdonságait tanulmányozták.

[72]Itt nem részletezhető, hogy a koherens kondenzátum létrejöttéhez a bozonok közötti gyenge

a „mágneses válaszfalat”, és észlelték az interferenciát, amelyet a kondenzátumok állandó fáziskülönbséggel rendelkező hullámfüggvényeinek szuperpozíciója hoz létre (ld. pl. http://physicsweb.org/article/world/10/3/3/2). A Bose-Einstein-kondenzátum tehát a koherens lézerfénynek anyaghullámmal megvalósított analogonja. Mint ilyen, a Bose-Einstein-kondenzáció alapja lehet **atomlézerek** létrehozásának, amelyekben a közönséges lézer fotonjainak szerepét atomok veszik át.

A Bose-Einstein-kondenzátumokat ma már felhasználják olyan Michelson[73]-interferométerek készítésére, amelyekben fény helyett kondenzátumok interferálnak (Ying-Yu Wang, Dana Z. Anderson, Victor M. Bright, Eric A. Cornell, Quentin Diot, Tetsuo Kishimoto, Mara Prentiss, R.A. Saravanan, Stephen R. Segal, Saijun Wu, An Atom Michelson Interferometer on a Chip Using a Bose-Einstein Condensate, cond-mat/0407689). Egy hullámvezetőben Bose-Einstein-kondenzátumot hoznak létre atomokból, amely kezdetben nyugalomban van. Ezt elektromágnesesen két kondenzátumra „hasítják”, amelyek ellentétes $\pm\vec{p}$ impulzusokkal mozognak és a hullámvezető végein elhelyezett tükrökön reflektálódnak. Végül, amikor a két kondenzátum visszaér a kiindulási helyére, akkor ott elektromágneses impulzusokkal újra egyesítik őket. A találkozó kondenzátumok ekkor meghatározott fáziskülönbséggel interferálnak. A fáziskülönbségüket úgy lehet változtatni, hogy a hullámvezető mentén térbeli gradienssel rendelkező mágneses teret alkalmaznak, amíg a két kondenzátum szét van választva egymástól. Az ilyen Michelson-interferométerek nagy előnye, hogy kis méretűek (egyetlen „chip”-en megvalósíthatók) és alkalmasak az elektromágneses mező finom változásainak érzékelésére. Valószínűleg érzékelőkben, úgynevezett szenzorokban nyernek majd technikai alkalmazást.

vonzó kölcsönhatás jelenléte is szükséges.

[73]Albert Abraham Michelsont (1852-1931) 1907-ben fizikai Nobel-díjjal tüntették ki precíziós optikai berendezéseiért és az azokkal végzett spektroszkópiai és metrológiai kutatásaiért. Edward Williams Morleyval (1838-1923) közösen végzett és világhírűvé vált interferometriás kísérlete (1887) a relativitáselmélet alapjául szolgál. Fontos az a felismerése, hogy a hosszegység visszavezethető hullámhossz mérésére.

6. KÖZELÍTŐ MÓDSZEREK

A kvantummechanikai problémák megoldása általában nem lehetséges egzaktul, hanem közelítő módszerek alkalmazását igényli. A kvantummechanikai problémák néhány tipikus csoportja

1. a stacionárius állapotok energiáinak és hullámfüggvényeinek meghatározása;
2. időben változó kölcsönhatások hatására átmenetek jöhetnek létre különböző kvantumállapotok között, ezek átmeneti amplitudójának meghatározása;
3. környezetükkel gyengén kölcsönható rendszerek elbomlanak, ilyen rendszerek energianívói kiszélesedésének és élettartamának (bomlási szélességének és felezési idejének) meghatározása.

Ezeken kívül még számos más, fontos problématípust lehetne említeni, amelyekkel azonban a jelen jegyzet keretein belül nem kívánunk foglalkozni.

6.1. Stacionárius állapotok meghatározása

A stacionárius állapotok meghatározása, azaz a stacionárius állapotok energiájának és hullámfüggvényének meghatározása egyike a kvantummechanika alapfeladatainak. Ez társulhat olyan további kérdések megválaszolásával, hogy bizonyos fizikai mennyiségeknek mi a várható értéke a stacionárius állapotokban. A feladat elvileg egzaktul megoldható, ha tetszőlegesen választunk egy bázist a Hilbert-térben és a Hamilton-operátor mátrixát diagonalizáljuk. A gyakorlatban ez a módszer csak azzal a közelítéssel alkalmazható, hogy a bázist csonkítani kell. A feladatot sokszor úgy érdemes megoldani, hogy a Hamilton-operátort két tag összegére bontjuk, $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, ahol $\hat{H}_0$ sajátértékproblémájának a megoldása ismert és V-t kicsiny zavarnak, gyengeperturbációnak lehet tekinteni. Ha a V zavar, gyenge kölcsönhatás csatolási állandója g, azaz $V \sim \mathcal{O}(g)$, akkor az eredeti, nem perturbált rendszer energiaszintjei és stacionárius állapotainak hullámfüggvényei csak kicsit különböznek a nem perturbált H_0 rendszer energiaszintjeitől és stacionárius állapotainak hullámfüggvényeitől. Ezeket az eltéréseket a g csatolási állandó hatványsora alakjában, úgynevezett perturbációs sor alakjában keressük. A módszert perturbációszámításnak nevezzük. Külön fogjuk tárgyalni azt az esetet, amikor az eredeti, nem perturbált rendszer energianívói nem elfajultak, ill. amikor elfajultak.

6.1.1. A Hamilton-operátor diagonalizálása

Oldjuk meg a

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{6.1.46}$$

sajátértékproblémát jól definiált (de itt nem specifikált) határfeltételekkel. Ez lehet pl. az, hogy a rendszer V térfogata véges. Ilyenkor minden energiasajátérték diszkrét, minden stacionárius állapot normája véges, és a $V \to \infty$ határesetet utóbb képezhetjük, ha arra vagyunk kiváncsiak.

Legyen az adott határfeltételeknek eleget tevő állapotok egy tetszőlegesen választott ortonormált teljes rendszere $\{|\phi_n\rangle\}$. (Ezek általában nem sajátvektorai a $\hat{H}$ Hamilton-operátornak.) Tetszőleges $|\psi\rangle$ állapot kifejthető ezen teljes rendser szerint:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n \phi_n, \qquad c_n = \langle \phi_n | \psi \rangle. \tag{6.1.47}$$

Ezt a kifejtést felhasználva a stacionárius Schrödinger-egyenlet

$$\sum_n c_n (\hat{H} - E) |\phi_n\rangle = 0 \tag{6.1.48}$$

alakot ölt. Szorozzunk rá az egyenlet mindkét oldalára balról a $\langle \phi_m|$ bra-vektorral és használjuk fel a $|\phi_n\rangle$ állapotvektorok ortonormáltságát, $\langle \phi_m | \phi_n \rangle = \delta_{m,n}$, akkor az alábbi homogén lineáris egyenletrendszert kapjuk az energiasajátaállapotok c_n kifejtési együtthatóira:

$$\sum_n (H_{m,n} - E\delta_{m,n}) c_n = 0. \tag{6.1.49}$$

ahol

$$H_{m,n} = \langle \phi_m | \hat{H} | \phi_n \rangle \tag{6.1.50}$$

a Hamilton-operátor mátrixa a $\{|\phi_n\rangle\}$ bázisban. A fenti egyenletrendszer megoldása a Hamilton-operátor mátrixának Általában az állapotok Hilbert-tere megszámlálhatóan végtelen dimenziós, úgyhogy a kapott homogén lineáris egyenletrendszer – bár egzakt – nem kezelhető numerikusan csak akkor, ha a bázist csonkítjuk, azaz csak véges sok, N darab bázisvektorral dolgozunk. Utóbbi esetben N darab csatolt, homogén lineáris egyenletből álló egyenletrendszert kell megoldanunk. Ennek akkor és csak akkor létezik nem triviális megoldása, ha az egyenletrendszer determinánsa zérus,

$$\det\,(H_{m,n} - E\delta_{m,n}) = 0. \tag{6.1.51}$$

Általában olyan bázisállapotokat szokás használni, amelyek egy $\hat{H}_0$ Hamilton-operátor sajátállapotai,

$$\hat{H}_0 |\phi_n\rangle = E_{0n} |\phi_n\rangle. \tag{6.1.52}$$

Ha a bázisállapotokat növekvő energia szerint rendezzük és az N darab legalacsonyabb energiához tartozót vesszük, akkor ebben a csonkított bázisban az (6.1.51) egyenlet $N \times N$-es mátrix determináns eltűnését követeli meg, és N darab gyöke van, E_r, $r = 1, 2, \ldots, N$. Ezek a $\hat{H}$ Hamilton-operátor legalacsonyabban fekvő energiájú sajátállapotai. A bázis csonkítása miatt általában a magasabban gerjesztett állapotok energiáját egyre pontatlanabbul lehet meghatározni. Az egyes E_r

energiasajátértékekhez tartozó hullámfüggvényeket, pontosabban a megfelelő $c_n^{(r)}$ együtthatókat a homogén lineáris egyenletrendszerből a megfelelő energiasajátérték behelyettesítése után határozhatjuk meg, ha a $\sum_{n=1}^{N} |c_n^{(r)}|^2 = 1$ normálási feltételt is figyelembe vesszük.

6.1.2. Idő-független, nem elfajult perturbáció-számítás

Az időtől független perturbációszámítás a stacionárius Schrödinger-egyenlet közelítő megoldásának egyik módszere. Előnye, hogy elvileg korlátlanul javítható, ha a perturbációs sor konvergens. A rendszer $\hat{H}$ Hamilton-operátorát két tag összegére bontjuk,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \tag{6.1.53}$$

ahol $\hat{H}_0$ az úgynevezett nem-perturbált rendszer Hamilton-operátora, $\hat{V}$ pedig a perturbáló kölcsönhatás. A nem perturbált rendszer $\hat{H}_0$ Hamilton-operátora általában a rendszer kinetikus energiájának operátorát tartalmazza és tartalmazhatja a kölcsönhatásból származó potenciális energia jelentős részét. Általában $\hat{H}_0$-t úgy választjuk, hogy ismert legyen a sajátérték-probléméjének a megoldása, a nem perturbált E_{0n} energiaszintek és a hozzájuk tartozó $|\phi_n\rangle$ energiasajátállapotok. A $\hat{V}$ zavar, azaz a perturbáció többnyire valamilyen g csatolási állandóval arányos. A perturbációszámítás akkor működik, ha g értéke kicsi. A jelen fejezetben feltesszük, hogy a perturbálatlan rendszer energianívói nem elfajultak. Ezért a perturbációszámításnak az ebben a fejezetben ismertetett változatát nem elfajult perturbációszámításnak szokás nevezni.

A feladatunk a perturbált rendszer Hamilton-operátora sajátérték-problémájának a megoldása,

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \tag{6.1.54}$$

Az egyenletet úgy oldjuk meg, hogy az állapotvektort is és az energiasajátértéket is a perturbáció g csatolási állandója szerint sorbafejtjük:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\psi^{[0]}\rangle + |\psi^{[1]}\rangle + |\psi^{[2]}\rangle + \dots, \\ E &= E^{[0]} + E^{[1]} + E^{[2]} + \dots \end{aligned} \tag{6.1.55}$$

ahol $|||\psi^{[r]}\rangle|| \sim g^r$ és $E^{[r]} \sim g^r$ a perturbációszámítás r-edik rendjében az állapotvektor és az energia korrekciója. Az állapotvektor különböző rendű korrekcióit kifejtjük a $|\phi_n\rangle$ bázisban,

$$|\psi^{[r]}\rangle = \sum_n c_n^{[r]} |\phi_n\rangle \tag{6.1.56}$$

ahol $c_n^{[r]} = \mathcal{O}(g^r)$.

Az $r = 0$-adik rendben a perturbálatlan rendszer E_{0n} energiaszintjéhez tartozó $|\phi_n\rangle$ állapottal indulunk, ezért $c_{n'}^{[0]} = \delta_{n,n'}$ és $|\psi_n^{[0]}\rangle = |\phi_n\rangle$, továbbá $E_n^{[0]} = E_{0n}$.

A perturbációszámítás különböző rendjeit úgy kapjuk, hogy a perturbációs sorokat behelyettesítjük a stacionárius Schrödinger-egyenletbe és annak két oldalán megköveteljük az azonos rendű tagok egyenlőségét:

$$\begin{aligned} & (\hat{H}_0 + \hat{V})(|\psi^{[0]}\rangle + |\psi^{[1]}\rangle + |\psi^{[2]}\rangle + \ldots) \\ = \; & (E^{[0]} + E^{[1]} + E^{[2]} + \ldots)(|\psi^{[0]}\rangle + |\psi^{[1]}\rangle + |\psi^{[2]}\rangle + \ldots) \end{aligned} \tag{6.1.57}$$

ahonnan a nullad-rendű, elsőr-rendű, másod-rendű, stb. tagok egyenlősége rendre

$$\begin{aligned} & \hat{H}_0|\psi^{[0]}\rangle = E^{[0]}|\psi^{[0]}\rangle \\ & \hat{H}_0|\psi^{[1]}\rangle + \hat{V}|\psi^{[0]}\rangle = E^{[0]}|\psi^{[1]}\rangle + E^{[1]}|\psi^{[0]}\rangle, \\ & \hat{H}_0|\psi^{[2]}\rangle + \hat{V}|\psi^{[1]}\rangle = E^{[0]}|\psi^{[2]}\rangle + E^{[1]}|\psi^{[1]}\rangle + E^{[2]}|\psi^{[0]}\rangle \\ & \vdots \end{aligned} \tag{6.1.58}$$

Számoljuk ki a perturbálatlan rendszer n-edik energiasajátállapotának megváltozását a $\hat{V}$ perturbáció hatására. Ekkor $E_n^{[0]} = E_{0n}$, $|\psi_n^{[0]}\rangle = |\phi_n\rangle$. A perturbációszámítás első rendjében:

$$\hat{H}_0|\psi_n^{[1]}\rangle + \hat{V}|\phi_n\rangle = E_{0n}|\psi_n^{[1]}\rangle + E_n^{[1]}|\phi_n\rangle. \tag{6.1.59}$$

Szorozzunk rá az egyenlet mindkét oldalára $\langle\phi_m|$ bra-vektorral,

$$\begin{aligned} & \langle\phi_m|\hat{H}_0|\psi_n^{[1]}\rangle + \langle\phi_m|\hat{V}|\phi_n\rangle \\ = \; & E_{0n}\langle\phi_m|\psi_n^{[1]}\rangle + E_n^{[1]}\delta_{m,n}, \\ & (E_{0m} - E_{0n})\langle\phi_m|\psi_n^{[1]}\rangle + \langle\phi_m|\hat{V}|\phi_n\rangle = E_n^{[1]}\delta_{m,n}, \\ & (E_{0m} - E_{0n})c_m^{[1]} + V_{m,n} = E_n^{[1]}\delta_{m,n}, \end{aligned} \tag{6.1.60}$$

ahol bevezettük a perturbáló potenciál

$$V_{m,n} = \langle\phi_m|\hat{V}|\phi_n\rangle \tag{6.1.61}$$

mátrixelemeit. Az egyszerűbb jelölés kedvéért nem jelöljük a $c_m^{[r]}$ sorfejtési együtthatók indexében azt, hogy melyik $|\psi_n\rangle$ állapotvektor korrekciójában szerepelnek. Az $m = n$ esetből megkapjuk az energia elsőrendű korrekcióját,

$$E_n^{[1]} = V_{n,n} \tag{6.1.62}$$

ami nem más, mint a perturbáló potenciál diagonális mátrixeleme a perturbálatlan $|\phi_n\rangle$ állapotban, azaz a perturbáció átlagenergiája. Az $m \neq n$ eset pedig az állapotvektor elsőrendű korrekciójának $c_m^{[1]}$ $(m \neq n)$ sorfejtési együtthatóit szolgáltatja,

$$c_m^{[1]} = -\frac{V_{m,n}}{E_{0m} - E_{0n}}. \tag{6.1.63}$$

A $c_n^{[1]}$ együtthatót a $\||\phi_n\rangle + |\psi_n^{[1]}\rangle\|^2 = 1$ normálási feltételből (csak az elsőrendű tagokat megtartva) határozható meg:

$$\begin{aligned} 1 &= \||\phi_n\rangle + |\psi_n^{[1]}\rangle\|^2 \\ &= 1 + \langle\phi_n|\psi_n^{[1]}\rangle + \langle\psi_n^{[1]}|\phi_n\rangle \\ &= 1 + c_n^{[1]} + c_n^{[1]\star} \end{aligned} \tag{6.1.64}$$

aminek $c_n^{[1]} = i\gamma_n$ a megoldása, ahol $\gamma_n\mathcal{O}(g)$ rendű valós szám. Ez azt jelenti, hogy az állapotvektor az elsőrendű korrekciókkal bezárólag

$$\begin{aligned} |\psi_n\rangle &= (1 + i\gamma_n)|\phi_n\rangle + \sum_{m\neq n} c_m^{[1]}|\phi_m\rangle + \mathcal{O}(g^2) \\ &= e^{i\gamma_n}|\phi_n\rangle + \sum_{m\neq n} \frac{\langle\phi_m|\hat{V}|\phi_n\rangle}{E_{0m} - E_{0n}}|\phi_m\rangle + \mathcal{O}(g^2) \\ &= e^{i\gamma_n}\left(|\phi_n\rangle + \sum_{m\neq n} \frac{\langle\phi_m|\hat{V}|\phi_n\rangle}{E_{0m} - E_{0n}}|\phi_m\rangle\right) + \mathcal{O}(g^2) \end{aligned} \tag{6.1.65}$$

Ez annak felel meg, hogy minden perturbált állapotvektor egy helyfüggetlen komplex fázissal szorzódik. Ezeknek azonban nincsen kihatása arra, hogy a perturbált állapotok ortonormáltsága fennálljon, és nem befolyásolják az energiaszintek korrekcióját sem. Az általánosság csorbítása nélkül élhetünk tehát a $\gamma_n = 0$ választással.

Tehát az energia és az állapotvektor változása a perturbációszámítás első rendjében:

$$E_{0n} \Rightarrow E_n = E_{0n} + V_{n,n}, \quad |\phi_n\rangle \Rightarrow |\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle - \sum_{m\neq n} \frac{V_{m,n}}{E_{0m} - E_{0n}}|\phi_m\rangle. \tag{6.1.66}$$

Az energia elsőrendű korrekciója aszerint pozitív, ill. negatív előjelű, hogy a perturbáció átlagenergiája milyen előjelű, azaz hogy rendre a perturbáció taszító, ill. vonzó kölcsönhatást jelent a $|\phi_n\rangle$ állapotban. Az állapotvektor megváltozása alapján látjuk, hogy a perturbációszámítás akkor adhat jó közelítséet, ha a perturbáció nem perturbált állapotok közötti mátrixelemeinek abszolutértéke legyen sokkal kisebb, mint a megfelelő nem perturbált állapotok energiájának különbsége:

$$|V_{m,n}| \ll |E_{0m} - E_{0n}|. \tag{6.1.67}$$

Az állapotvektor megváltozása azt mutatja, hogy a perturbáció hatására az n-edik perturbálatlan állapot állapotvektorához a perturbáció hatására egyre csökkenő amplitudóval keveredenek hozzá az n-edik nem perturbált állapottól energiában egyre távolabb levő állapotok. Az is nyilvánvaló, hogy ha a nem perturbált rendszer energiaszintjei nagyon közel vannak egymáshoz, azaz az energiaspektrum csaknem elfajult, vagy szélső esetben elfajult, akkor a perturbációszámítás szerinti korrekció

nagyon naggyá válik, ill. divergál, azaz ebben a formájában nem alaklmazható a perturbációszámítás. Az elfajult energiaspektrumú rendszer perturbációjával majd a következőfejezetben fogunk foglalkozni.

Térjünk most vissza a nem elfajult energiaspektrumú rendszer perturbációjára. A perturbációszámítás második rendjében

$$\hat{H}_0|\psi_n^{[2]}\rangle + \hat{V}|\psi_n^{[1]}\rangle = E_{0n}|\psi_n^{[2]}\rangle + V_{n,n}|\psi_n^{[1]}\rangle + E_n^{[2]}|\phi_n\rangle \tag{6.1.68}$$

amit a $\langle\phi_m|$ bra-vektorral szorozva

$$\begin{aligned} & (E_{0m} - E_{0n})c_m^{[2]} - \sum_{n'\neq n} \frac{V_{n',n}}{E_{0n'} - E_{0n}} \langle\phi_m|\hat{V}|\phi_{n'}\rangle \\ = & -V_{n,n} \sum_{n'\neq n} \frac{V_{n',n}}{E_{0n'} - E_{0n}} \langle\phi_m|\phi_{n'}\rangle + E_n^{[2]}\delta_{m,n} \\ & (E_{0m} - E_{0n})c_m^{[2]} - \sum_{n'\neq n} \frac{(V_{m,n'} - V_{n,n}\delta_{m,n'})V_{n',n}}{E_{0n'} - E_{0n}} = E_n^{[2]}\delta_{m,n} \end{aligned} \tag{6.1.69}$$

Innen az $m = n$ esetben kapjuk az energia másodrendű korrekcióját,

$$E_n^{[2]} = -\sum_{n'\neq n} \frac{|V_{n',n}|^2}{E_{0n'} - E_{0n}} \tag{6.1.70}$$

és az $m \neq n$ eset pedig az állapotvektor másodrendű korrekciójának együtthatóit,

$$c_m^{[2]} = \sum_{n'\neq n} \frac{(V_{m,n'} - V_{n,n}\delta_{m,n'})V_{n',n}}{(E_{0m} - E_{0n})(E_{0n'} - E_{0n})} = \sum_{n'\neq n} \frac{V_{m,n'}V_{n',n}}{(E_{0m} - E_{0n})(E_{0n'} - E_{0n})} - \frac{V_{m,n}V_{n,n}}{(E_{0m} - E_{0n})^2}. \tag{6.1.71}$$

A $c_n^{[2]}$ együtthatót a normálási feltételből kapjuk meg (a másodrendű tagokkal bezárólag őrizve meg a tagokat):

$$\begin{aligned} 1 &= \langle\phi_n|\phi_n\rangle + \langle\phi_n|\psi_n^{[1]}\rangle + \langle\psi_n^{[1]}|\phi_n\rangle + \langle\psi_n^{[1]}|\psi_n^{[1]}\rangle + \langle\phi_n|\psi_n^{[2]}\rangle + \langle\psi_n^{[2]}|\phi_n\rangle \\ &= 1 + \sum_m |c_m^{[1]}|^2 + c_n^{[2]} + c_n^{[2]\star} \end{aligned} \tag{6.1.72}$$

aminek megoldása:

$$\begin{aligned} c_n^{[2]} &= -\frac{1}{2}\sum_m |c_m^{[1]}|^2 = -\frac{1}{2}\sum_{m\neq n} |c_m^{[1]}|^2 \\ &= -\frac{1}{2}\sum_{m\neq n} \frac{|V_{m,n}|^2}{(E_{0m} - E_{0n})^2}, \end{aligned} \tag{6.1.73}$$

ahol ismét elhanyagoltunk egy lényegtelen fázist. Az n-edik energianívó és a hozzátartozó energiasajátállapot tehát a perturbáció-számítás második rendjével bezárólag rendre

$$
\begin{aligned}
E_n &= E_{0n} + V_{n,n} - \sum_{n' \neq n} \frac{|V_{n',n}|^2}{E_{0n'} - E_{0n}}, \\
|\psi_n\rangle &= |\phi_n\rangle - \sum_{m \neq n} \frac{V_{m,n}}{E_{0m} - E_{0n}} |\phi_m\rangle \\
&\quad + \sum_{m \neq n} \left[\sum_{n' \neq n} \frac{V_{m,n'} V_{n',n}}{(E_{0m} - E_{0n})(E_{0n'} - E_{0n})} - \frac{V_{m,n} V_{n,n}}{(E_{0m} - E_{0n})^2} \right] |\phi_m\rangle \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{m \neq n} \frac{|V_{m,n}|^2}{(E_{0m} - E_{0n})^2} |\phi_n\rangle. \qquad (6.1.74)
\end{aligned}
$$

Érdemes megemlíteni, hogy az alapállapot energiájának másodrendű korrekciója mindig negatív, ilyenkor ugyanis az összegzés az összes $m \neq n$ gerjesztett állapotra történik, amelyekre $E_{0m} - E_{0n} > 0$.

6.1.3. Degenerált perturbáció-számítás

Tegyük fel, hogy a perturbálatlan rendszer energiaszintjei elfajultak és azt is, hogy a perturbáció energiája sokkal kisebb, mint a nem perturbált rendszer szomszédos energiaszintjeinek távolsága. Ekkor a perturbáció a nem perturbált rendszer egy-egy energiaszintjéhez tartozóállapotainak keveredését és az egyes energiaszintek elfajultságának csökkenését vagy teljes megszűnését eredményezi, de nem keverednek a szomszédos energiaszintekhez tartozó állapotok.

Tegyük fel, hogy a nem perturbált rendszer E_n energiaszintjének a perturbáció hatására történő felhasadását vizsgáljuk. A perturbálatlan rendszer E_n energiaszintjéhez az állapotok Hilbert-terének egy s_n dimenziós altere tartozik, ahol s_n az n-edik energianívó elfajultságának foka. Legyenek $|\phi_{nr}\rangle$ $(r = 1, 2, \ldots, s)$ ortonormált bázisállapotok, amelyek kifeszítik a nem perturbált rendszer E_n energiához tartozó állapotainak az alterét. A perturbált rendszer stacionárius állapotai a

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})|\psi\rangle = E'|\psi\rangle \qquad (6.1.75)$$

stacionárius Schrödinger-egyenlet megoldásai. Általában a perturbált rendszer állapotai kifejthetők a nem perturbált rendszer stacionárius állapotainak teljes rendszere szerint. Ha a perturbáció gyenge, azaz a $V_{m,n}$ mátrixelemek abszolut értéke kicsi a nem perturbált rendszer szomszédos energianívóinak a távolságához képest, akkor – mint azt a nem elfajult perturbációszámítás mutatja, – elhanyagolható annak a valószínűsége, hogy a perturbáció miatt a nem perturbált rendszer különböző energiaszintjeihez tartozó állapotai keveredjenek a perturbáció miatt. Ugyanakkor formálisan a zérus energiakülönbségű, azaz degenerált állapotok keveredésére a

nem elfajult perturbációszámítás szingularitást jelez. Valójában azzal a közelítéssel élhetünk, hogy a nem perturbált rendszer egy adott energiaszintjéhez tartozó állapotok keverednek csak egymással. Így feltehetjük, hogy a perturbált rendszer energiasajátérték problémájának megoldását úgy kereshetjük, hogy a nem perturbált rendszer minden egyes energiaszintjéhez megkeressük a perturbált rendszer állapotainak megfelelő multiplettjét. Ezért a stacionárius Schrödinger-egyenletnek olyan megoldásait keressük, amelyek jó közelítéssel csak egy-egy adott energiaszinthez tartozó nem perturbált állapotok lineáris kombinációi:

$$|\psi\rangle = \sum_r c_r |\phi_{nr}\rangle. \tag{6.1.76}$$

Ezt behelyettesítve a stacionárius Schrödinger-egyenletbe:

$$\sum_{r=1}^{s_n} c_r (\hat{H}_0 + \hat{V})|\phi_{nr}\rangle = E' \sum_r c_r |\phi_{nr}\rangle, \tag{6.1.77}$$

ahonnan a tetszőleges $\langle\phi_{nr'}|$ vektorral történő skaláris szorzással kapjuk az állapotvektor kifejtési együtthatóira az alábbi homogén lineáris algebrai egyenletrendszert:

$$\sum_{r=1}^{s_n} [(E_n - E')\delta_{r',r} + V_{(n,r'),(n,r)}] c_r = 0. \tag{6.1.78}$$

Ennek akkor és csak akkor létezik nem triviális megoldása, ha az egyenletrendszer determinánsa nulla,

$$\det\, [(E_n - E')\delta_{r',r} + V_{(n,r'),(n,r)}] = 0. \tag{6.1.79}$$

Az $s_n \times s_n$-es mátrix determinánsának eltűnése matematikai szempontból az E' változó s_n-edrendű polinomjának eltűnését követeli meg. Ennek az egyenletnek pontosan s_n darab gyöke van. A gyökök valósak, mert a Hamilton-operátor önadjungált. Előfordulhatnak azonban azonos gyökök is, azaz általában nem biztos, hogy a perturbáció hatására a degeneráció teljes mértékben megszűnik[74]. A nem perturbált rendszer E_n energiaszintje a (6.1.79) egyenlet megoldásaiként meghatározható $E'_{n,m}$ ($m = 1, 2, \ldots, s'_n, \quad s'_n \leq s_n$) energiaszintekre hasad fel. Az m-edik energiaszinthez tartozó állapotot, ill. alteret az $E'_{n,m}$ energiasajátértéknek a (6.1.78) homogén lineáris egyenletbe történő visszahelyettesítésével és annak a megfelelő (adott m-hez tartozó) c_r együtthatókra történő megoldásával határozhatjuk meg.

Nézzük azt az egyszerű példát, amikor a nem perturbált rendszer E energiaszintje 2-szeresen elfajult. Legyenek a $|\phi_r\rangle$ ($r = 1, 2$) az elfajult energiaszinthez

[74] Az, hogy a degeneráció milyen mértékben szűnik meg, azzal kapcsolatos, hogy a nem perturbált rendszer szimmetriái közül, melyeket sért le a perturbáció explicit módon.

tartozó ortonormált állapotok. A (6.1.78) homogén lineáris egyenl etrendszer explicit alakja:

$$\begin{pmatrix} E - E' + V_{1,1} & V_{1,2} \\ V_{2,1} & E - E' + V_{2,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0. \tag{6.1.80}$$

A (6.1.79) egyenlet

$$(E - E' + V_{1,1})(E - E' + V_{2,2}) - |V_{1,2}|^2 = 0, \tag{6.1.81}$$

azaz

$$(E' - E)^2 - (V_{1,1} + V_{2,2})(E' - E) + V_{1,1}V_{2,2} - |V_{1,2}|^2 = 0 \tag{6.1.82}$$

alakot ölt, ahonnan a másodfokú egyenlet megoldóképlete segítségével a gyökök:

$$E'_{\pm} = E + \frac{1}{2}(V_{1,1} + V_{2,2}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(V_{1,1} - V_{2,2})^2 + |V_{1,2}|^2}. \tag{6.1.83}$$

Látjuk, hogy ha $V_{1,1} = V_{2,2}$ és $V_{1,2} = 0$, akkor az energiaszint nem hasad fel, hanem a nem elfajult perturbációszámításnak megfelelő elsőrendű energiakorrekciót szenved, $E' = E + V_{1,1}$. Általában azonban a degeneráció megszűnik.

Ha a fent ismertetett degenerált perturbációszámítás az energiaszintek elfajultságának megszűnését mutatja, akkor az eredményül kapott energiaszintek és állapotok, mint a nem elfajult perturbációszámítás nulladrendű közelítése, kiinduló pontként használhatók a perturbációszámítás magasabb rendjeinek megfelelő korrekciók meghatározásához, ami most már a nem elfajult perturbációszámítás módszerével történhet.

6.2. Időfüggő perturbációk

Most azzal az esettel foglalkozunk, amikor a nem perturbált rendszert az időtől ismert módon függő külső behatásnak vetjük alá, és amikor a külső térrel való kölcsönhatás energiája sokkal kisebb, mint a nem perturbált rendszer szomszédos stacionárius állapotainak energiakülönbsége. Ekkor a külső térrel történő kölcsönhatás perturbációnak tekinthető. Ha a külső tér és a vizsgált fizikai rendszer kölcsönhatását g csatolási állandó jellemzi, akkor a g csatolási állandó Taylor-soraként állítható elő az egyes energiaszintek és a hozzájuk tartozó állapotoknak a perturbáció miatti megváltozása.

6.2.1. Fermi-féle „aranyszabály”

Legyen a nem perturbált rendszer (időtől független) Hamilton-operátora $\hat{H}_0$, és jelölje a perturbáló, időtől ismert módon függő külső térrel történő kölcsönhatás operátorát $\hat{V}(t)$. Tegyük fel, hogy ismertek a nem perturbált rendszer stacionárius

állapotai, jelölje E_n a megfelelő energiaszinteket, $|\phi_n\rangle$ a megfelelő időtől független állapotvektorokat. Ekkor a nem perturbált rendszer stacionárius állapotainak időtől függő állapotvektorai $e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|\phi_n\rangle$. Keressük a perturbált rendszerre vonatkozó, időtől függő Schrödinger-egyenlet,

$$i\hbar\partial_t|\Psi(t)\rangle = [\hat{H}_0 + \hat{V}(t)]|\Psi(t)\rangle, \tag{6.2.84}$$

megoldását

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_m c_m(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}|\phi_m\rangle \tag{6.2.85}$$

alakban. Az időfüggő perturbáció következménye, hogy a nem perturbált rendszer stacionárius állapotainak triviális időfüggésének explicit módon történt leválasztśa után a $c_n(t)$ sorfejtési együtthatók még további időfüggést kell, hogy tartalmazzanak. Helyettesítsük be a (6.2.85) sorfejtést az időfüggő Schrödinger-egyenletbe:

$$\sum_m [i\hbar\dot{c}_m(t) + E_m c_m(t)]e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}|\phi_m\rangle = \sum_m c_m(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}[E_m + \hat{V}(t)]|\phi_m\rangle, \tag{6.2.86}$$

majd szorozzuk az egyenlet mindkét oldalát a $\langle\phi_{m'}|$ bra-vektorral. Ekkor a $c_{m'}(t)$ sorfejtési együtthatókra az alábbi közönséges elsőrendű, változó együtthatós, homogén lineáris differenciálegyenlet-rendszert kapjuk:

$$i\hbar\dot{c}_{m'}(t) = \sum_m e^{\frac{i}{\hbar}(E_{m'}-E_m)t}V_{m',m}(t)c_m(t) = \sum_m \bar{V}_{m',m}(t)c_m(t), \tag{6.2.87}$$

ahol

$$\bar{V}_{m',m}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}(E_{m'}-E_m)t}V_{m',m}(t) = \langle\phi_{m'}(t)|\hat{V}(t)|\phi_m(t)\rangle \tag{6.2.88}$$

a perurbáló potenciál operátorának mátrixa az időtől függő, perturbálatlan stacionárius állapotok alkotta ortonormált bázisban.

Ha a nem perturbált rendszer E_n energiaszintjéhez tartozó $|\phi_n\rangle$ állapot perturbációját akarjuk meghatározni, akkor az (6.2.87) egyenletrendszert a $c_m(0) = \delta_{m,n}$ kezdőfeltétellel kell megoldanunk.

A perturbatív megoldás lényege, hogy a $c_m(t)$ együtthatókat a perturbáló $\hat{V}$ potenciál g csatolási állandójának növekvő hatványai szerinti Taylor-sor alakjában keressük,

$$c_m(t) = c_m^{[0]} + c_m^{[1]}(t) + \ldots, \tag{6.2.89}$$

ahol $c_m^{[r]}(t) \sim \mathcal{O}(g^r)$ a korrekció a perturbációszámítás r-edik rendjében. A megfelelő rendű tagok egyenlősége alapján határozzuk meg a sorfejtési együtthatók különböző rendű korrekcióit, rendre a perturbációszámítás egyre növekvő rendjeiben. A nulladik rendben a

$$i\hbar\dot{c}_m^{[0]} = 0 \tag{6.2.90}$$

egyenlet adódik, ahonnan

$$c_m^{[0]} = \text{ const. } = c_m(0). \tag{6.2.91}$$

A perturbációszámítás első rendjében a $c_m^{[1]}(t)$ korrekcióra az alábbi egyenletet kapjuk:

$$i\hbar\dot{c}_{m'}^{[1]}(t) = \sum_m \bar{V}_{m',m}(t)c_m^{[0]}(t). \tag{6.2.92}$$

Innen integrálással azt kapjuk, hogy

$$c_{m'}^{[1]}(t) = \frac{-i}{\hbar}\sum_m \left(\int_0^t dt'\bar{V}_{m',m}(t')\right)c_m(0). \tag{6.2.93}$$

Alkalmazzuk a kapott eredményt arra az esetre, amikor a $t = 0$ időpillanatban a rendszer a perturbálatlan Hamilton-operátor n-edik stacionárius állapotában tartózkodik. Ekkor a perturbáció bekapcsolása után t idővel kialakuló állapot

$$\begin{aligned} |\psi_n(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|\phi_n\rangle + \sum_m c_m^{[1]}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}|\phi_m\rangle \\ &= [1 + c_n^{[1]}(t)]e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|\phi_n\rangle + \sum_{m\neq n} c_m^{[1]}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}|\phi_m\rangle. \end{aligned} \tag{6.2.94}$$

Ebből látszik, hogy annak a folyamatnak az amplitudója, hogy a $|\phi_n\rangle$ perturbálatlan stacionárius állapotból a rendszer az időtől függő perturbáció hatására átmenetet szenvedjen a $|\phi_m\rangle$ perturbálatlan stacionárius állapotba, éppen a

$$c_{m\leftarrow n}^{[1]}(t) = \frac{-i}{\hbar}\int_0^t dt'\bar{V}_{m,n}(t') \tag{6.2.95}$$

együttható. Ezért annak a $w_{m\leftarrow n}(t)$ valószínűsége, hogy az $n \to m$ átmenet t idő alatt létrejön a perturbáció hatására:

$$w_{m\leftarrow n}(t) = |c_{m\leftarrow n}^{[1]}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t dt'\bar{V}_{m,n}(t')\right|^2. \tag{6.2.96}$$

Tekintsük az elsőrendű perturbációszámítás eredményének két speciális alkalmazását:

1. *Időtől független perturbáció esete.* Ez az eset „fából vaskarikának” tűnhet, de meg fogjuk látni, hogy mégis érdemes komolyan venni. Arról van szó, hogy a $t = 0$ időpillanatban hatni kezd a $\hat{V}$ időtől független perturbáció, ami aztán a t időpillanatban megszűnik (valójában tehát van időfüggése). A stacionárius állapotú rendszer $n \to m$ átmenetének valószínűsége ekkor

$$\begin{aligned} w_{m\leftarrow n}(t) &= \frac{|\bar{V}_{m,n}|^2}{\hbar^2}\left|\int_0^t dt' e^{-i\omega_{m,n}t'}\right|^2 \\ &= \frac{|\bar{V}_{m,n}|^2}{\hbar^2}\left|\frac{e^{-i\omega_{m,n}t'} - 1}{-i\omega_{m,n}}\right|^2 \\ &= \frac{2|\bar{V}_{m,n}|^2}{\hbar^2}\frac{1 - \cos(\omega_{m,n}t)}{\omega_{m,n}^2} \end{aligned} \tag{6.2.97}$$

ahol $\omega_{m,n} = (E_n - E_m)/\hbar$. Vizsgáljuk meg először, hogyan függ az átmenet valószínűség az átmenet $\omega_{m,n}$ frekvenciájától. Az átmeneti valószínűség az $\omega_{m,n}$ változónak $\omega_{m,n} = 0$ helyen főmaximummal rendelkező, páros függvénye. A főmaximum értéke

$$w_{m\leftarrow n}(t) = \frac{g^2|v_{m,n}|^2 t^2}{4\hbar^2}, \quad \text{ha } \omega_{m,n} = 0, \tag{6.2.98}$$

a függvénynek $\omega_{m,n} = \pm 2\pi/t,\ \pm 4\pi/t,\ \pm 6\pi/t, \ldots$ helyeken minimumai vannak, amelyek értéke zérus, a mellékmaximumok értékei rohamosan csökkennek, ha $|\omega_{m,n}|$ nő. Ha a perturbáció bekapcsolásától számítva elég hosszú t idő telt el, $t \gg 2\pi/\omega_{m,n}$, akkor az átmenet valószínűsége (lásd a függeléket):

$$w_{m\leftarrow n}(t) = \frac{2\pi|\bar{V}_{m,n}|^2}{\hbar^2} t\delta(\omega_{m,n}), \tag{6.2.99}$$

ami azt jelenti, hogy végtelen idő alatt az időtől független perturbáció hatására csak az azonos energiájú állapotok között történhet átmenet. Véges, de nagy t esetén azonban olyan állapotok között is történhet átmenet véges valószínűséggel, amelyek közti δE energiakülönbség nagyságrendje olyan, hogy $\delta E = \hbar\omega_{m\leftarrow n} = \mathcal{O}(\hbar\pi/t)$ megfelel a $w_{m\leftarrow n}(t)$ átmeneti valószínűség főmaximumához tartozó csúcs félértékszélességének. Az ilyen állapotok, ha léteznek, az $[E_n - \delta E, E_n + \delta E]$ keskeny energiasávban foglalnak helyet, amelynek szélességét $2\delta E \sim 2\pi\hbar/t$ jellemzi. A következő pontban részletesen fogunk érvelni amellett, hogy a ,,nem perturbált" rendszer $\hat{H}_0$ Hamilton-operátorának spektruma valóban állhat ,,kiszélesedett" energiaszintekből, vagyis sok nagyon közeli energiájú energiaszintből álló keskeny energiasávokból, amelyeket egymástól jelentős energiakülönbség választ el. (Azt is látni fogjuk, hogy az energiaszintek ilyen kiszélesedése maga is valamiféle perturbáció következménye, amely már bele van foglalva a mostani ,,nem perturbált" $\hat{H}_0$ Hamilton-operátorba.)

Vezessük, be a ,,kiszélesedett" nívóhoz tartozó m állapotok energia szerinti sűrűségét. Legyen $\rho_M(E)dE$ azon állapotok száma az $(E, E + dE)$ energiaintervallumban, amelyek az M-edik kiszélesedett nívóhoz (az M-edik keskeny sávhoz) tartoznak. Nyilvánvalóan $\rho_M(E)$ olyan függvény, amely csak egy E_M energia körüli keskeny, Γ szélességű energiasávban vesz fel zérustól különböző értékeket; Γ-t nívószélességnek nevezzük. Annak a valószínűsége, hogy ezen kiszélesedett energianívó n-edik állapotából az m-edik állapotába átmenet történjen, úgy kapható meg, hogy adott n esetén a $w_{m\leftarrow n}(t)$ átmeneti valószínűségeket összegezni kell az összes lehetséges végállapotra, amit a $\rho_M(E)$ állapotsűrűség segítségével az E energia szerinti integrálással helyettesíthetünk,

$$W_{M\leftarrow n}(t) = \int w_{m\leftarrow n}(t)\rho_M(E)dE = \int 2|\bar{V}_{m,n}|^2 \frac{1 - \cos[(E - E_n)t/\hbar]}{(E - E_n)^2}\rho_M(E)dE \tag{6.2.100}$$

Ha E_m és E_n egyazon M kiszélesedett nívóhoz tartozó állapotok, akkor a $w_{m\leftarrow n}(t)$ átmeneti valószínűségi főmaximuma beleesik abba az intervallumba, ahol az adott kiszélesedett nívóhoz tartozó $\rho_M(E)$ energiasűrűség nem nulla. Ugyanakkor az állapotsűrűség és a $\bar{V}_{m,n}$ átmeneti mátrixelem is lassan változó függvénye E-nek, míg a $\frac{1-\cos[(E-E_n)t/\hbar]}{(E-E_n)^2}$ függvény gyorsan változik. úgyhogy jó közelítés a lassú változású tényezőket az $E = E_n \approx E_M$ helyen venni és kiemelni az energia szerinti integrál elé,

$$W_{M\leftarrow n}(t) \approx 2|\bar{V}_{m,n}|^2\rho_M(E_n)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1-\cos[(E-E_n)t/\hbar]}{(E-E_n)^2}dE \quad (6.2.101)$$

Itt az integrandus annyira éles maximummal rendelkezik $E = E_n$ helyen, ha t nagy, hogy az integrálás határait kiterjeszthettük a végtelenig. Felhasználva a z integrandus $(\pi t/\hbar^2)\delta((E-E_n)/\hbar)$ aszimptotikus viselkedését $t \to \infty$ esetén, azt kapjuk, hogy

$$W_{M\leftarrow n}(t) \approx \frac{2\pi t}{\hbar}|\bar{V}_{m,n}|^2\rho_M(E_n). \quad (6.2.102)$$

Innen az időegységre eső átmeneti valószínűség

$$w_{M\leftarrow n} = \frac{dW_{M\leftarrow n}(t)}{dt} \approx \frac{2\pi}{\hbar}|\bar{V}_{m,n}|^2\rho_M(E_n). \quad (6.2.103)$$

Ez a Fermi-féle ,,aranyszabály", amelyet itt most az egyazon, ill. közel egyazon energiához tartozó átmenetek valószínűségére kaptunk meg az időfüggő perturbációszámítás első rendjében. Ilyen átmenetek jönnek létre részecske potenciálszórása esetén, amikor a szóródás rugalmas, a részecske energiája megmarad. A kezdeti n állapotot az impulzusa, $\vec{p}_i$ egyértelműen kijelöli, a szórt részecske m állapotát valamilyen $\vec{p}_f$ impulzus jellemzi, miközben a részecske energiája megmarad, $E_i = \frac{p_i^2}{2m} = E_f = \frac{p_f^2}{2m}$. A végállapoti impulzusnak csak az iránya lehet tetszőleges. Az összes végállapotok száma, amelyekben a $\vec{p}_f$ impulzus adott irány körüli $d\Omega$ térszögbe esik és energiája $(E, E+dE)$,

$$\rho(E)dEd\Omega = \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{p^2dp}{(2\pi\hbar)^3}d\Omega. \quad (6.2.104)$$

A kijelölt $d\Omega$ térszögbe időegység alatt történő átmenet, azaz szóródás valószínűsége tehát

$$wd\Omega = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle\vec{p}_f|\hat{V}|\vec{p}_i\rangle|^2\rho(E)d\Omega, \quad (6.2.105)$$

ahol

$$\rho(E)d\Omega = \frac{p^2}{(2\pi\hbar)^3\frac{dE}{dp}}d\Omega = \frac{mp}{(2\pi\hbar)^3}d\Omega. \quad (6.2.106)$$

Ha figyelembe vesszük hogy korábbi jelölésünk szerint $wd\Omega = j_{\mathrm{sz}}d\Omega$, akkor a differenciális szórási hatáskeresztmetszetre az időfüggő perturbációszámítás első rendjében

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{2\pi}{\hbar v_{\mathrm{be}}}|\langle\vec{p}_f|\hat{V}|\vec{p}_i\rangle|^2\rho(E) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar v_{\mathrm{be}}}|\langle\vec{p}_f|\hat{V}|\vec{p}_i\rangle|^2\frac{mp}{(2\pi\hbar)^3} \end{aligned} \tag{6.2.107}$$

adódik. Ez a differenciális szórási hatáskeresztmetszet úgynevezett Born-közelítése.

2. *Időben periodikus perturbáció esete, rezonancia-jelenség.*

Természetesen érdekes lehet az az eset is, amikor nem azonos, ill. közel azonos energiájú állapotok között jön létre átmenet az időfüggő perturbáció hatására. Alkalmazzuk az átmeneti amplitudóra az időfüggő perturbációszámítás első rendjében kapott eredményt olyan esetre, amikor a perturbáló potenciál adott körfrekvenciájú, periodikus időfüggéssel rendelkezik. A perturbáló potenciál önadjungált operátorának általános alakja akkor $\hat{V}(t) = g(\hat{v}e^{i\omega t} + \hat{v}^\dagger e^{-i\omega t})$, ahol $\hat{v}$ időtől független operátor. Innen

$$\begin{aligned}\int_0^t dt'\bar{V}_{m,n}(t') &= g\int_0^t dt' e^{-i\omega_{m,n}t'}[v_{m,n}e^{i\omega t'} + v^*_{n,m}e^{-i\omega t'}] \\ &= -ig\left(\frac{v_{m,n}e^{i(-\omega_{m,n}+\omega)t} - 1}{-\omega_{m,n}+\omega} + v^*_{n,m}\frac{e^{i(-\omega_{m,n}-\omega)t} - 1}{-\omega_{m,n}-\omega}\right), \end{aligned} \tag{6.2.108}$$

ahol bevezettük azt az $\omega_{m,n} = (E_n - E_m)/\hbar$,,előjeles" körfrekvenciát, ami megfelel a perturbálatlan rendszer m-edik és n-edik energianívója közti előjeles energiakülönbségnek, továbbá ahol $v_{m,n} = \langle\phi_m|\hat{v}|\phi_n\rangle$. Az $n \to m$ átmenet t idő allatti bekövetkezésének valószínűsége

$$w_{m\leftarrow n}(t) = \frac{g^2|v_{m,n}|^2}{4\hbar^2}\left|\frac{e^{i(-\omega_{m,n}+\omega)t} - 1}{-\omega_{m,n}+\omega} + \frac{e^{i(-\omega_{m,n}-\omega)t} - 1}{-\omega_{m,n}-\omega}\right|^2 \tag{6.2.109}$$

A jobb oldalon az abszolut érték alatti kifejezés első tagjának $\omega = \omega_{m,n}$ esetén, második tagjának $\omega = -\omega_{m,n}$ esetén van jelentős járuléka. Az első tag olyan $n \to m$ átmeneteknek felel meg, amikor a rendszer a perturbáció hatására energiát sugároz ki és olyan alacsonyabban gerjesztett állapotba kerül, amelynek energiája $2\pi\hbar/t$ bizonytalansággal

$$E_m \approx E_n - \hbar\omega + \mathcal{O}(2\pi\hbar/t). \tag{6.2.110}$$

Értelemszerűen a második tag pedig olyan átmeneteknek felel meg, amikor a rendszer energiát nyel el,

$$E_m \approx E_n + \hbar\omega + \mathcal{O}(2\pi\hbar/t). \tag{6.2.111}$$

Ha az egyes energianívók $\Gamma \neq 0$, nem zérus szélességűek, de t elég nagy ahhoz, hogy $\Gamma \ll 2\pi\hbar/t$ legyen, akkor a két amplitudó nem interferál. Ekkor pl. az emisszió időegységre eső valószínűsége

$$W_{M\leftarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar}|v_{m\leftarrow n}|^2\rho_M(E_M). \tag{6.2.112}$$

Ismét a Fermi-féle aranyszabály van érvényben. Teljesen hasonló eredményre jutunk az energiaelnyelés esetén. Összegezve tehát mondhatjuk, hogy a periodikus perturbáció a rendszert rezonanciaszerű energiakisugárzásra, vagy energiaelnyelésre készteti, ha léteznek olyan energiaszintjei, amelyek közötti energiakülönbség $2\pi\hbar/t$ bizonytalansággal megfelelnek perturbáló potenciál körfrekvenciája által meghatározott $\hbar\omega$ energiaadagnak. Az időfüggő perturbációszámítás ezért a foton fogalmától függetlenül adja magyarázatát az energiaszintek közötti energiafelvétellel, ill. leadással járó átmeneteknek.

Nívószélesség. Beszéljünk végül arról, hogy miért lehetséges, hogy egy rendszer energiaszintjei keskeny sávokká szélesedjenek ki. Ehhez azt kell figyelembe venni, hogy általában az átmenetet elszenvedő rendszer (nevezzük továbbiakban atomnak) nincsen elszigetelve a környezetétől. Pl. ki van téve a környezet termikus gerjesztéseinek, aminek következtében a TKP-ja nincsen nyugalomban, hanem véletlenszerűen vesz fel különböző nagyságú és irányú sebességeket, ezért az atom a saját nyugalmi rendszerében a Doppler-effektus következtében ω-tól kicsit különbözőnek érzékeli a perturbáció frekvenciáját. Ez a laborrendszerben nyugvó megfigyelő számára ugyanazt jelenti, mintha az energiaszintjei valójában a sebeségeloszlásnak megfelelően megjelenő keskeny energiasávok lennének (a TKP-i E_n, ill. E_m energiákhoz véletlenszerűen hozzájárul a TKP mozgásának linetikus energiája). Azt mondjuk, hogy az energiaszintek Doppler-kiszélesedést szenvednek a termikus környezetben. A hőmérséklet csökkentésével a Doppler kiszélesedés szigorúan monoton csökkenthető. Hasonló kiszélesedés az eredménye az elektromágneses mezővel történő (állandóan jelentkező, ,,kikapcsolhatatlan") kölcsönhatásnak. Az ebből származó kiszélesedést természetes vonalszélességnek nevezzük. Egyetlen E_n energiaszint tehát a kiszélesedés miatt valójában sok, energiában közeli állapotból álló $E_n \pm \frac{1}{2}\Gamma$ energia-intervallumot kitöltő keskeny energiasávot jelent, általában $\Gamma \ll E_n$.

A periodikus perturbáció hatására bekövetkező emisszió valószínűségére kapott formulánkat alkalmazhatjuk egy E_n energiájú atomi állapot elbomlására. Ennek eredménye, hogy keletkezik egy alacsonyabb, E_m energiájú atom és egy $\hbar\omega$ energiájú foton. A perturbációt ekkor a mindenütt jelenlevő, kvantált elektromágneses mező jelenti. Az energia megmaradása csak $\mathcal{O}(2\pi\hbar/t)$ pontossággal teljesül:

$$E_n = E_m + \hbar\omega + \mathcal{O}(2\pi\hbar/t). \tag{6.2.113}$$

Ez azt jelenti, hogy hiába tudjuk adott kezdeti pillanatban pontosan megmérni az atom energiáját, aztán t idővel később ugyancsak pontosan megmérni a végtermékek

E_m és $\hbar\omega$ energiáit, a két, egymást t időközzel követő energiamérés elvileg nem tudja az energiamegmaradást pontosabban ellenőrizni, mint a δE energiabizonytalanság, amelyre fennáll a

$$\delta E \; t \sim \hbar \tag{6.2.114}$$

,,határozatlansági reláció. Bomlási folyamat esetén a $\tau = \hbar/\Gamma$ időtartamot az állapot élettartamának nevezzük. Meg lehet mutatni, hogy es lényegében az állapot bomlástörvényből ismert felezési ideje.

6.2.2. Nívószélesség és élettartam, bomlási szélesség és felezési idő

6.3. Kváziklasszikus közelítés

7. KITEKINTÉS

7.1. A Feynman-féle pályaintegrálos kvantálás

7.2. Részecskefizika és kvantumtérelmélet. Az alapvető kölcsönhatások

FÜGGELÉK

A. A kvantummechanika kísérleti alapjai

A fizikai kísérletek között néhány különösen érdekes és fontos a kvantummechanika szempontjából, mert olyan jelenségek megfigyelésével kapcsolatos, amelyeket a kvantummechanika nélkül, csak a klasszikus mechanika, elektrodinamika és statisztikus fizika alapján nem lehetne megérteni. Így ezek a kísérletek nagyon meggyőzően igazolják a kvantummechanikát. Egy részük olyan megoldatlan problémákat szolgáltatott a maga idején, amelyek hozzájárultak a kvantummechanika létrejöttéhez. Más részüket jóval a kvantummechanika létrejötte után, a kísérleti technika jelentős fejlődésének köszönhetően tudták először elvégezni.

A.1. A kvantummechanika kísérleti előzményei

A.1.1. A foton, mint az elektromágneses mező részecskéje

Először azokat a kísérleteket vesszük sorra, amelyek alapján nyilvánvalóvá vált, hogy az elektromágneses sugárzásnak részecskeszerű tulajdonságai is vannak. Hasonló tulajdonságai vannak a rácsszerkezettel rendelkező szilárdtestek atomrácsában kialakuló rugalmas állóhullámoknak, azaz az atomrács kollektív jellegű kisrezgéseinek is.

1. *A feketetest sugárzása, a hőmérsékleti sugárzás.*

   A klasszikus elektrodinamikai tanulmányaink során megtanultuk, hogy a szabad elektromágneses tér egy vezető üregében elektromégneses állóhullámok lineáris kombinációjaként írható le. Az elektromágneses állóhullámokat a $\vec{k}$ hullámvektoruk jellemzi. Ennek értéke az üreg határán kirótt határfeltételek[75] miatt csak diszkrét értékeket vehet fel, mégpedig olyan módon, hogy téglatest alakú üregben valamennyi, L_j $(j = 1, 2, 3)$ hosszúságú élre a hullámvektor megfelelő k_j $(j = 1, 2, 3)$ Descartes[76]-komponenséből számolt $\frac{1}{2}\lambda_j = \frac{\pi}{k_j}$ félhullámhossz $n_j = 0, 1, 2, 3, \ldots$ egész számszor férjen rá, $n_j \frac{1}{2}\lambda_j = L_j$

   $$k_j = \frac{\pi}{L_j} n_j; \tag{A.1}$$

   (az $n_x = n_y = n_z = 0$ triviális esetet kizárjuk). Az egyszerűség kedvéért vegyünk a továbbiakban kocka alakú üreget, akkor a hullámvektor lehetséges diszkrét értékei:

   $$\vec{k} = \frac{\pi}{L} \left(n_x, \quad n_y, \quad n_z \right). \tag{A.2}$$

   Minden $\vec{k}$ hullámvektorral jellemzett állóhullám két független,egymásra merőleges rezgés szuperpozíciója, mert az elektromos térerősség merőleges a hullámvektorra és

[75] A határfeltétel az, hogy az elektromos térerősség érintőirányú komponense, ill. a mágneses indukció normális irányú komponense zérus a vezető üregének felületén.

[76] René Cartesius Descartes (1596-1650, francia) filozófus, fizikus és matematikus. Nevéhez fűződik a fénytörés törvénye, a Snellius-Descartes-törvény. Fizikai világképének maradandó eleme az a felismerés, hogy a mozgás kölcsönhatás eredménye, amelyet azonban a testek közvetlen érintkezése révén megvalósuló közelhatásként képzelt el.

a merőleges síkban két független irány létezik. Jelöljék az $\vec{e}^{\alpha}_{\vec{k}}$ ($\alpha = 1, 2$) egységvektorok a $\vec{k}$ hullámvektorra merőleges síkban a két, független, merőleges irányt, akkor a $\vec{k}$ hullámvektorhoz tartozó állóhullám:

$$\vec{E}_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \sum_{\alpha=1,2} \vec{e}^{\alpha}_{\vec{k}} E^{\alpha}_{\vec{k}}(\vec{r}, t). \tag{A.3}$$

A teljes elektromágneses mező az üregben ilyen állóhullámú módusok szuperpozíciója:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \sum_{n_x, n_y, n_z} \vec{E}_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \sum_{n_x, n_y, n_z} \sum_{\alpha=1,2} \vec{e}^{\alpha}_{\vec{k}} E^{\alpha}_{\vec{k}}(\vec{r}, t). \tag{A.4}$$

A Maxwell-egyenletek következménye, hogy ezek a módusok lineáris harmonikus oszcillátorok, mert a

$$\frac{\partial^2 E^{\alpha}_{\vec{k}}(\vec{r}, t)}{\partial t^2} + \omega^2_{\vec{k}} E^{\alpha}_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = 0 \tag{A.5}$$

egyenletnek tesznek eleget, ahol

$$\omega^2_{\vec{k}} = c^2 \vec{k}^2 \tag{A.6}$$

a módus körfrekvenciájának a négyzete. A klasszikus elektrodinamika keretében azt is be lehet látni, hogy az elektromégneses mező energiasűrűsége az egyes állóhullámú módusok energiasűrűségeinek az összege:

$$u = \frac{1}{4\pi} \vec{E}^2 = \sum_{n_x, n_y, n_z} \sum_{\alpha=1,2} \frac{1}{4\pi} (E^{\alpha}_{\vec{k}})^2 \tag{A.7}$$

Ez azt jelenti, hogy az elektromégneses mező energiája a vezető üregében úgy tekinthető, mint független lineáris harmonikus oszcillátorok energiája. Egy-egy lineáris harmonikus oszcillátor egy-egy állóhullámú módusnak felel meg és az (n_x, n_y, n_z) egész számokkal ill. az α polarizációs iránnyal jellemezhető.

A klasszikus fizikában minden állóhullámú módus energiája tetszőleges lehet, mert a módus amplitudója folytonosan, bármilyen nem negatív, valós értéket felvehet, az energiasűrűség pedig ennek a négyzetével arányos. Határozzuk meg, hogy mennyi energiát hordoz egy módus átlagosan, ha az elektromágneses mező az üregben termikus egyensúlyban van a T hőmérsékletű fémmel. Egyszerűbben tudunk számolni, ha feltesszük, hogy egy lineáris oszcillátor csak $\epsilon_n = n\epsilon_0$ energiát tud felvenni, ahol $n = 0, 1, 2, \ldots$ egész szám, ϵ_0-lal pedig a számolás végén nullához fogunk tartani. Boltamanntól[77] származik annak a felismerése, hogy egy részecske, egy oszcillátor, ha egyensúlyban van a T hőmérsékeltű környezettel, akkor

$$w_n = \frac{e^{\frac{-\epsilon_n}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{\frac{-\epsilon_n}{k_B T}}} \tag{A.8}$$

[77]Ludwig Boltzmann (1844-1906, osztrák) fizikus. Kísérletileg igazolta a Maxwell-elmélet által megkövetelt kapcsolatot a fény örésmutatója, a relatív dielektromos állandó és a relatív mágneses permeabilitás között. További fontos eredményei: az entrópia és a termodinamikai valószínűség kapcsolatának felismerése, a Maxwell-Boltzmann-eloszlás és a feketetest-sugárzsra vonatkozó Stefan-Boltzmann-törvény elméleti megalapozása.

valószínűséggel tölti be az ϵ_n energiájú állapotát. Ha ez így van, akkor egy oszcillátor átlagos energiája

$$\bar{\epsilon} = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n w_n = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n e^{\frac{-\epsilon_n}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{\frac{-\epsilon_n}{k_B T}}}. \tag{A.9}$$

Ennek kiszámolásához induljunk ki a mértani sor

$$\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \tag{A.10}$$

képletéből és deriváljuk azt az x kvóciens szerint:

$$\frac{1}{(1-x)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} n x^{n-1}. \tag{A.11}$$

Vegyük ezeket a sorokat $x = e^{\frac{-\epsilon_0}{k_B T}}$ helyettesítéssel, akkor

$$\bar{\epsilon} = \epsilon_0 \frac{\frac{1}{(1-x)^2}}{\frac{1}{1-x}} x = \frac{\epsilon_0 e^{\frac{-\epsilon_0}{k_B T}}}{1 - e^{\frac{-\epsilon_0}{k_B T}}} = \frac{\epsilon_0}{e^{\frac{\epsilon_0}{k_B T}} - 1} \xrightarrow{\epsilon_0 \to 0} k_B T \tag{A.12}$$

adódik. Ez azt jelenti, hogy a klasszikus fizika szerint termikus egyensúlyban minden oszcillátor átlagosan $k_B T$ energiát hordoz, vagyis érvényesül az energia ekvipartíciójának törvénye: az energia egyenletesen oszlik el az egyes oszcillátorokon, azaz a rendszer szabadsági fokain.

Most már csak az a kérdés, hány olyan módus van, amelynek körfrekvenciája az $(\omega, \omega + d\omega)$ infinitezimális intervallumba esik? Azoknak a módusoknak, amelyeknek a körfrekvenciája $\leq \omega$, az (n_x, n_y, n_z) Descartes-koordinátarendszerben olyan pontok felelnek meg, amelyek egységnyi rácsállandójú kockarács rácspontjai, és amelyek belül helyezkednek el az $R = \frac{\omega L}{\pi c}$ sugarú gömbön. Ezek száma

$$N_\omega = \frac{\frac{4\pi R^3}{3}}{1^3} = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{L}{\pi c} \right)^3 \omega^3. \tag{A.13}$$

Innen deriválással adódik, hogy az $(\omega, \omega + d\omega)$ infinitezimális intervallumban található módusok száma,

$$dN_\omega \equiv g_\omega d\omega = 4\pi \left(\frac{L}{\pi c} \right)^3 \omega^2 d\omega \tag{A.14}$$

növekvő körfrekvenciával négyzetesen nő. Itt g_ω az ún. állapotsűrűség, az állóhullámú módusok körfrekvencia szerinti sűrűsége.

Mivel az üregben az állóhullámú módusok frekvencia szerinti sűrűsége növekvő frekvenciával négyzetesen nő, és minden módus átlagosan $k_B T$ energiát hordoz, azért a klasszikus fizika szerint a feketest-sugárzás energiasűrűsége,

$$u = \frac{1}{L^3} k_B T \int_0^\infty g_\omega d\omega \to \infty, \tag{A.15}$$

végtelen nagynak adódik. Ez az ún. **Rayleigh[78]-Jeans[79]-féle ultraibolya katasztrófa.** Ha ez igaz lenne, akkor a feketetest üregéből végtelen nagy energia lenne kinyerhető.

Planck[80] jött rá, hogy a fenti megfontolást csupán egy ponton módosítva el lehet érni, hogy növekvő frekvenciával a módusok átlagos energiája sokkal kisebb legyen mint k_BT, s így véges eredményt lehet kapni. **A Planck-féle hipotézis az volt, hogy az ω körfrekvenciájú lineáris harmonikus oszcillátor nem vehet fel tetszőleges energiát, hanem csak az $\epsilon_0 = \hbar\omega$ energiaadag egész számszorosát, $\epsilon_n = n\epsilon_0$, $(n = 0, 1, 2, \ldots)$.** Valóban, ekkor a fenti számolás változatlan, csupán nem szabad az $\epsilon_0 \to 0$ határértéket venni. A T hőmérsékeltű környezetével termikus egyensúlyban lévő, ω körfrekvenciájú oszcillátor átlagos energiája

$$\bar{\epsilon}_{\vec{k}} = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_BT}} - 1}. \tag{A.16}$$

Ez az átlagos energia alacsony frekvenciájú módusok esetén, azaz ha $\frac{\hbar\omega}{k_BT \ll 1}$, közelítőleg $\bar{\epsilon}_{\vec{k}} \approx k_BT$, vagyis annyi mint amennyit a klasszikus fizika alapján kapnánk. Ugyanakkor a nagyfrekvenciás, ún. ultraibolya módusok átlagos energiája, amelyekre $\frac{\hbar\omega}{k_BT \gg 1}$, közelítőleg

$$\bar{\epsilon}_{\vec{k}} \approx \hbar\omega e^{\frac{-\hbar\omega}{k_BT}}, \tag{A.17}$$

ami növekvő körfrekvenciával exponenciálisan csökken. Az $(\omega, \omega + d\omega)$ infinitezimális intervallumban található módusok az energiasűrűséghez tehát

$$du = \frac{1}{L^3} g_\omega \bar{\epsilon}_{\vec{k}} d\omega = \frac{1}{L^3} \frac{\hbar\omega g_\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_BT}} - 1} d\omega \equiv \rho(\omega) d\omega \tag{A.18}$$

járulékot adnak. Az összes módus együttes járuléka tehát az energiasűrűséghez

$$\begin{aligned} u &= \int_0^\infty \frac{1}{L^3} g_\omega \bar{\epsilon}_{\vec{k}} d\omega \\ &= 4\pi \left(\frac{1}{\pi c}\right)^3 \int_0^\infty \frac{\hbar\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_BT}} - 1} d\omega = const.T^4 < \infty \end{aligned} \tag{A.19}$$

véges érték, amely arányos a hőmérséklet negyedik hatványával. Ez a feketetest sugárzásának Stefan[81]-Boltzmann-féle törvénye. A kísérletek nemcsak ezt, hanem a Planck-féle sugárzási törvényt,

$$\rho(\omega) d\omega = 4\pi \left(\frac{1}{\pi c}\right)^3 \frac{\hbar\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_BT}} - 1} d\omega \tag{A.20}$$

is fényesen igazolják. Utóbbi az egységnyi körfrekvencia-intervellumban adja meg az energia sűrűségét a feketest-sugárzásban. Végül a Wien[82]-féle eltolódási törvény

[78] Lord (John William Strutt) Rayleigh (1842-1919, angol) 1904-ben fizikai Nobel-díjat kapott a legfontosabb gázok sűrűségének kutatásáért és azért, hogy kutatásai során felfedezte az argont.

[79] Sir James Hopwood Jeans (1877-1946, angol) matematikus, fizikus, csillagász.

[80] Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858-1947, német) 1918-ban fizikai Nobel-díjat kapott a Fizika fejlődéséért az energiakvantum felfedezésével tett szolgálataiért.

[81] Joseph Stefan (1835-1893, osztrák) fizikus, a kinetikus gázelmélet egyik megalapozója.

[82] Wilhelm Carl Werner Otto Fritz Franz Wien (1864-1928, német) 1911-ben fizikai Nobel-díjat kapott a hősugárzás törvényeivel kapcsolatos felfedezéseiért.

is kiolvasható belőle, ha megkeressük, hol van a $\rho(\omega)$ függvény maximuma. Az az ω_{m} körfrekvencia, amelyhez tartozó módusok maximálisan járilna hozzá az energiasűrűséghez, azaz amely frekvencián maximális a feketetest sugárzásának $c\rho(\omega)$ intenzitása, arányos a feketetest hőmérsékletével, azaz $\frac{\hbar\omega_m}{k_B T}$ =áll.

A kvantummechanika szempontjából a feketest sugárzásának tanulmányozása a Planck-féle hipotézisre vezetett: annak feltételezésére, hogy az elektromágneses állóhullámok kvantáltak, azaz nem vehetnek fel, ill. adhatnak le tetszőleges energiát, hanem csak az ω körfrekvenciájuk által meghatározott $\hbar\omega$ energiadag egész számú többszöröseit. A fény részecskéjének, a fotonnak a felfedezéséhez vezető úton ez volt az első jelentős lépés.

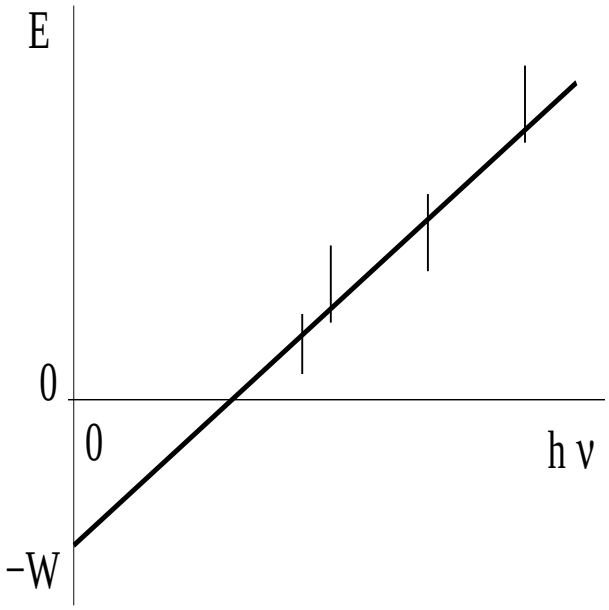
A feketetest-sugárzás a Világegyetem fejlődésében is jelentős szerepet játszott. A megfigyelések[83] azt mutatják, hogy **az egész Világegyetemből izotróp módon érkezik hozzánk elektromágneses háttérsugárzás,** az ún. **kozmikus háttérsugárzás. A kozmikus háttérsugárzás intenzitásának frekvencia szerinti eloszlása megegyezik egy olyan Planck-eloszlással, amely termikus egyensúlyban levő, $T = 2,7$ K hőmérsékletű feketetest-sugárzáshoz tartozik.** A jelenséget úgy magyarázzuk, hogy a Világegyetem fejlődése során volt egy pillanat, amikor a még szabadon jelenlevő, elektromosan töltött elektronok, protonok és az elektromágneses sugárzás egymással termikus egyensúlyba került. Ezután a Világegyetem tágulása következtében az anyag hűlni kezdett és a töltött részecskék semleges atomokat alkottak. Ekkor lényegében megszűnt az elektromágneses térnek a kondenzált anyaggal való kölcsönhatása. A visszamaradt, annak idején az anyaggal termikus egyensúlyban levő elektromágneses sugárzás azóta szabadon terjed a még mindig táguló Világegyetemben és ezt észleljük kozmikus háttérsugárzásként. A kozmikus háttérsugárzás jelenleg észlelt hőmérsékletéből az ún. gravitációs vöröseltolódás alapján vissza lehet következtetni arra a hőmérsékletre, amellyel a Világegyetem az elektromágneses sugárzásnak az anyagról való lecsatolódása pillanatában rendelkezett. abból pedig, hogy a különböző irányokból hozzánk érkező kozmikus háttérsugárzás hőmérséklete kb. $\frac{\Delta T}{T} \approx 10^{-4}$ nagyságrendű relatív ingadozásokat mutat, arra lehet következtetni, hogy a tér lapos, azaz nem görbült, euklideszi geometriájú a Világegyetem méretskáláján. Ettől eltérések a tapasztalat szerint csak „kis” méretekben, lokálisan vannak pl. csillagok, feketelyukak közelében.

2. *A fotoeffektus.* **A fényelektromos jelenség, idegen nevén a fotoeffektus lényege, hogy a fémek felületét fénnyel megvilágítva a fémből elektronok lépnek ki.** A fényelektromos jelenséget Lénárd Fülöp[84] fedezte fel. Monokromatikus fényt bocsátott alkáli fémre és azt tapasztalta, hogy ennek hatására a fémből azonos kinetikus energiájú elektronok lépnek ki. A tapasztalat szerint **a kilépő elektronok kinetikus energiája nem függ a fény intenzitásától (energiaáramsűrűségének a periódusidőre vett átlagától), a kilépő elektronok száma azonban arányos a fény intenzitásával. A kilépő elektronok E kinetikus energiája arányos a fény ν frekvenciájával,**

$$h\nu = E + W, \tag{A.21}$$

[83] Arno Allan Penzias (1933-, német-amerikai) és Robert Woodrow Wilson (1936-, amerikai) egynegyed-egynegyed arányban részesültek az 1978. évi fizikai Nobel-díjban a kozmikus mikrohullámú háttérsugárzás felfedezéséért, amely a Nagy Bumm elméletének legmeggyőzőbb kísérleti bizonyítéka.

[84] Philipp Eduard Anton von Lenard (1862-1947, magyar-német) a katódsugarak kutatásáért 1905-ben fizikai Nobel-díjat kapott.



5. ábra. Fotoeffektus során kilépő elektronok kinetikus energiája a monokromatikus besugárzó fény frekvenciájának függvényében.

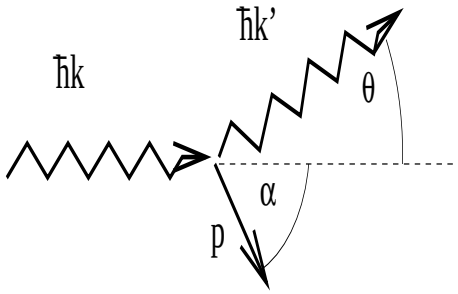
ahol W az adott fémre jellemző állandó. A Einstein[85] az összefüggést úgy értelmezte, hogy a fény, azaz a ν frekvenciájú (azaz $\omega = 2\pi\nu$ körfrekvenciájú) elektromágneses sugárzás $h\nu = \hbar\omega$ energiaadagokból, fotonokból áll abban az értelemben, hogy energiát (esetünkben a fémnek) csak $\hbar\omega$ energiaadagokban tud átadni. Ha ezt az energiát egy elektron kapja meg, akkor ez az energia részben annak kinetikus energiájára, részben pedig a kilépési munkára fordítódik. A kilépési munka az a munka, amelyet az elektronnak végeznie kell azokkal az elektromos erőkkel szemben, amelyek rá a fémből való kirepülés során a fém részéről fellépnek. A fémnek időegység alatt egységfelületen átadott $\hbar\omega$ energiaadagok száma arányos a beeső fény intenzitásával, s ha mindegyik energiakvantum egy-egy elektronnak adódik át, akkor az időegység alatt az egységfelületből kilépő elektronok száma arányos a beeső fény intenzitásával.

3. *Compton-szórás.* **Ha Röntgen[86]-sugárzás szóródik atomon, akkor frekvencia-eltolódást figyelhetünk meg, amelynek értéke függ a szórási szögtől. Ez a Compton[87]-szórás jelensége,** amelyet Compton fedezett fel és Compton és

[85] Albert Einstein (1879-1955, német-amerikai) 1921-ben fizikai Nobel-díjat kapott az Elméleti Fizika terén kifejtett szolgálataiért, különös tekintettel a fotoeffektus törvényének felfedezésére.

[86] Wilhelm Conrad Roentgen (1845-1923, német) kapott először fizikai Nobel-díjat, 1901-ben azon rendkívüli szolgálatainak elismeréseként, amelyeket a később róla elnevezett, figyelemre méltó sugarak felfedezésével tett.

[87] Arthur Holly Compton (1892-1962, amerikai) 1927-ben megosztott Nobel-díjat kapott a róla elnevezett szórási jelenség felfedezéséért. A fizikai Nobel-díj msik kitüntetettje ugyanakkor Charles Thomson Rees Wilson (1869-1959, skót) volt, aki a díjat azért az általa kifejlesztett módszerért kapta, amellyel az elektromosan töltött részecskék útját láthatóvá tette gőzök lecsapódása (kondenzációja) révén.



6. ábra. A Compton-szórás sematikus ábrája.

Debye[88] a foton fogalmának segítségével értelmeztek.

A kísérletben azért használunk Röntgen-sugárzást, hogy az atomi elektront kezdetben nyugalomban levő, szabad elektronnak lehessen tekinteni. Essen $\vec{k}$ hullámvektorú, $\omega = kc$ körfrekvenciájú Röntgen-sugárzás az m_e nyugalmi tömegű, kezdetben közelítőleg zérus impulzusú elektronra. Legyen az ütközés után az elektron impulzusa $\vec{p} = \frac{m_e\vec{v}}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$, a Röntgen-sugárzás hullámvektora $\vec{k}'$, körfrekvenciája $\omega' = k'c$. Legyen a Röpntgen-sugárzás szórási szöge θ, az elektron $\vec{p}$ impulzusának a $\vec{k}$ hullámvektorral bezárt szöge α (lásd 6. ábra). **Ha azzal a feltevéssel élünk, hogy a Röntgen-sugárzás egyszerre hordozza az összetartozó $\hbar\omega$ energia- és a $\hbar\vec{k}$ impulzusadagot,** akkor az energia- és az impulzusmegmaradás törvénye:

$$\hbar\omega + m_e c^2 = \hbar\omega' + \frac{m_e c^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}},$$
$$\hbar\vec{k} = \hbar\vec{k}' + \frac{m_e\vec{v}}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}. \tag{A.22}$$

Bontsuk az impulzusokat a bejövő $\vec{k}$ iránnyal párhuzamos és arra merőleges komponensekre:

$$\hbar\frac{\omega}{c} = \hbar\frac{\omega'}{c}\cos\theta + \frac{m_e v}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\cos\alpha,$$
$$0 = \hbar\frac{\omega'}{c}\sin\theta - \frac{m_e v}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\sin\alpha. \tag{A.23}$$

[88] Petrus Josephus Wilhelmus Debye (1884-1966, holland-amerikai) az 1936. évi kémiai Nobel-díj kitüntetettje, a díjat azért kapta, mert a molekulák szerkezetére vonatkozó ismereteinket bővítette részben dipólmomentumok vizsgálata, részben Röntgen-sugárzás és elektronok gázokban történő elhajlítása révén.

A második egyenlet segítségévek tüntessük el α-t az első egyenletből:

$$\left(\hbar\frac{\omega}{c}-\hbar\frac{\omega'}{c}\cos\theta\right)^2+\left(\hbar\frac{\omega'}{c}\sin\theta\right)^2=\left(\frac{m_e v}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\right)^2,$$
$$\left(\hbar\frac{\omega}{c}\right)^2+\left(\hbar\frac{\omega'}{c}\right)^2-2\hbar\frac{\omega}{c}\hbar\frac{\omega'}{c}\cos\theta=\left(\frac{m_e v}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\right)^2,$$
$$\left(\hbar\frac{\omega}{c}-\hbar\frac{\omega'}{c}\right)^2+4\hbar\frac{\omega}{c}\hbar\frac{\omega'}{c}\sin^2\frac{\theta}{2}=\left(\frac{m_e v}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\right)^2. \tag{A.24}$$

Végül az energiamegmaradás törvényének segítségével tüntessük el az elektron v sebességét:

$$\begin{aligned}\left(\frac{m_e v}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\right)^2 c^2 &= \left(\frac{m_e c^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\right)^2-m_e^2c^4\\ &= \left(\hbar\omega-\hbar\omega'+m_ec^2\right)^2-m_e^2c^4\\ &= \left(\hbar\omega-\hbar\omega'\right)^2+2\left(\hbar\omega-\hbar\omega'\right)m_ec^2,\end{aligned} \tag{A.25}$$

úgyhogy

$$\left(\hbar\omega-\hbar\omega'\right)^2+4\hbar^2\omega\omega'\sin^2\frac{\theta}{2}=\left(\hbar\omega-\hbar\omega'\right)^2+2\left(\hbar\omega-\hbar\omega'\right)m_ec^2,$$
$$\omega-\omega'=\frac{2\hbar}{m_ec^2}\omega\omega'\sin^2\frac{\theta}{2} \tag{A.26}$$

adódik a Röntgen-sugárzás frekvenciájának eltolódására. Ebből látjuk, hogy a szórt sugárzás frekvenciája kisebb, mint a bejövő sugárzásé. A frekvenciaeltolódás előreszórás esetén zérus, 180° fokos visszaszórás esetén pedig maximális.

Szokásosabb a frekvenciaeltolódás helyett a hullámhossz növekedést megadni:

$$\lambda'-\lambda=4\pi\frac{\hbar}{m_ec}\sin^2\frac{\theta}{2}. \tag{A.27}$$

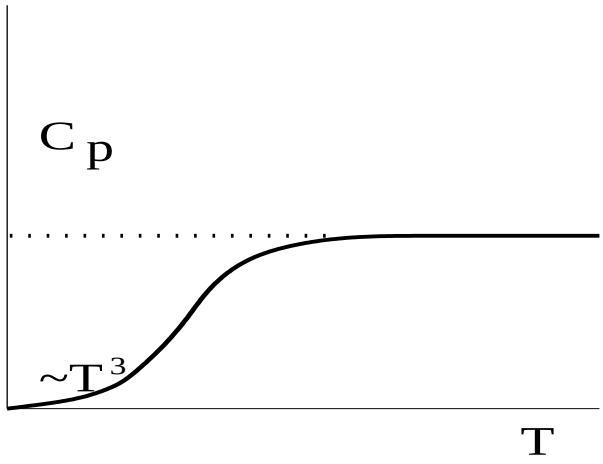
Az itt fellépő

$$\lambda_c=\frac{2\pi\hbar}{m_ec}=\frac{h}{m_ec} \tag{A.28}$$

mennyiséget **az elektron Compton-hullámhosszának** nevezzük. Alapvetően ez határozza meg, hogy az elektromágneses sugárzás az elektront milyen kiterjedésűnek látja. A Compton-szórás differenciális hatáskeresztmetszete arányos λ_c^2-tel.

4. *A szilárdtestek alacsony hőmérsékleti fajhője.*

A szilárdtestek fajhője széles hőmérsékleti tartományban állandó, eleget tesz az ún. Dulong-Petit-törvénynek[89]. Alacsony hőmérsékleten azonban



7. ábra. Szilárdtestek fajhőjének hőmérséklet-függése.

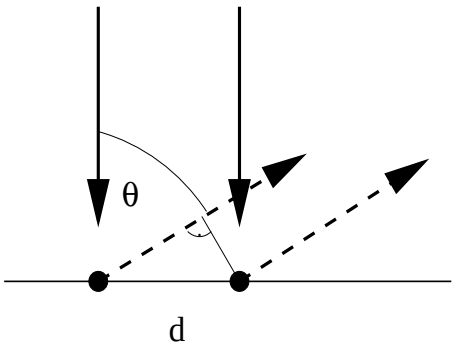
a szilárdtestek fajhője nem független a hőmérséklettől, hanem $c_p \propto T^3$ hőmérséklet-függést mutat (ld. 7. ábra).

A szilárdtestek alacsony hőmérsékleti fajhőjének hőmérséklet-függését azon feltevés alapján sikerült megérteni, hogy a fémet alkotó kristályrács kollektív rugalmas kisrezgései, a rugalmas állóhullámok kvantáltak: nem vehetnek fel és adhatnak le tetszőleges értékű energiát, hanem csak a ν frekvenciájuk által meghatározott diszkrét értékű energiadagokat, a $h\nu$ energiaadag egészszámszorosát. Ezen túlmenően, adott energiaadag felvétele ill. leadása jól meghatározott impulzusadag felvételét ill. leadását is jelenti. A szigorúan összetartozó energia- és impulzusadag felvételét, ill. leadását úgy tekinthetjük az energia- és az impulzusmegmaradás szempontjából, mint részecske, ún. **fonon** keltését, ill. megsemmisítését a rendszerben. A jelen jegyzet kereteit meghaladja a jelenség részletes tárgyalása.

[89]Pierre Louis Dulong (1785-1838, francia) fizikus és Alexis Thérése Petit (1721-1820, francia) fizikus nevéhez fűződő törvény. A Dulong-Petit-törvény azon alapul, hogy az atomok kristályrácsot alkotnak, amely rugalmas kisrezgéseket végez, ha a szilárdtest hőmérséklete $T \neq 0$. A kollektív kisrezgések valójában az atomrácsban kialakuló rugalmas állóhullámok. Hasonlóan, mint az elektromágneses mezőben, egy tetszőleges állóhullám rugalmas állóhullámú módusok lineáris szuperpozíciójaként állítható elő. A tetszőleges rugalmas hullám energiája az összetevő állóhullámú módusok energiáinak az összege. Most is belátható, hogy ha bármely állóhullámú módus energiája tetszőleges értéket felvehet, akkor egy állóhullámú módus átlagos energiája k_BT. Ezt nevezik az ekvipartíció törvényének: a T hőmérsékletű rezgő rendszer energiája egyenletesen oszlik el az egyes állóhullámú módusokon. Ellentétben a feketetest-sugárzással, véges V térfogatú testben csak véges sok állóhullámú módus van, mert a hullámvektor abszolut értéke nem lehet nagyobb mint $\mathcal{O}(\frac{2\pi}{a})$, ahol a a rácsállandó. A rezgőrendszer teljes energiája $E =$ módusok száma $\cdot k_BT$, ahonnan a fajhő

$$c_p = \frac{1}{V}\frac{\partial E}{\partial T} = \frac{1}{V}\text{módusok száma } \cdot k_B, \tag{A.29}$$

ami független a hőmérséklettől. Ez a Dulong-Petit-törvény.



8. ábra. A Davisson-Germer-kísérlet sematikus ábrája.

A.1.2. Anyaghullámok

Ebben az alfejezetben olyan kísérleti eredményekről lesz szó, amelyek arra világítanak rá, hogy az elektron, mint jól definiált töltéssel rendelkező, a pontrészecskékre vonatkozó Einstein-féle energia, impulzus és nyugalmi tömeg közötti összefüggést kielégítő részecske interferenciára képes önmagával.

1. *Davisson és Germer kísérlete.* **A Davisson[90]-Germer[91]-kísérlet azt bizonyítja, hogy ha azonos p impulzusú elektronok esnek merőlegesen egy egykristály felületére, akkor a különböző irányokban szóródott elektronok ugyanolyan jellegű elhajlási képet hoznak létre, mint amilyet a megfelelő $\lambda = \frac{h}{p}$ hullámhosszú Röntgen-sugárzás hozna létre.**

   A jelenség lényege, hogy az egykristály felülete egy kristálysík, amelyen az egymástól d távolságra elhelyezkedő atomokon szóródik a felületre merőlegesen beeső síkhullám (ld. 8. ábra). Két, szomszédos atom által szórt hullám útkülönbsége $d \sin\theta$, ha a beesési merőlegeshez képest θ szög alatt szórt hullámot nézzük. Az elhajlási képben azokban a θ_n irányokban kapunk intenzitás-maximumot, amelyekre a

$$d \sin\theta_n = n\lambda \tag{A.30}$$

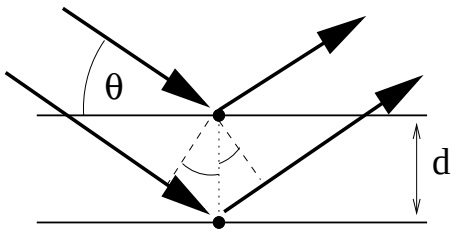
   feltétel teljesül valamilyen n, pozitív egész számra: a szomszédos atomokról θ irányba szóródott hullámok útkülönbsége a hullámhossz egész számú többszöröse. Korábban Röntgen-sugarakkal figyeltek meg ilyen elhajlási képet. Elektronok esetén a maximumok azokban az irányokban jelentkeznek, amelyekre

$$d \sin\theta_n = n\frac{h}{p}. \tag{A.31}$$

   Ebből arra lehet következtetni, hogy a p impulzusú elektron ebben a kísérletben ugyanúgy viselkedik, mintha $\lambda = h/p$ hullámhosszú klasszikus hullám lenne.

[90] Az 1937. évi fizikai Nobel-díjat Clinton Joseph Davisson (1881-1958, amerikai)és Sir George Paget Thomson (1892-1975, angol) megosztva kapták azért, hogy kísérletileg felfedezték az elektronoknak a kristályokon történő elhajlását (diffrakcióját).

[91] Lester Halbert Germer (1896-1971, amerikai) fizikus Davissonnal együtt bebizonyította az anyag részecske-hullám dualitását, ami alapvető jelentőségű volt az elektronmikroszkóp kifejlesztése szempontjából.



9. ábra. Segédábra a Bragg-feltétel megfogalmazásához.

2. *Thomson kísérlete.* **Thomson[92] megmutatta, hogy a Debye-Scherrer[93]-módszerben adott impulzusú elektronnyalábot alkalmazva monokromatikus Röntgen-sugárzás helyett, ugyanolyan elhajlási képet kapunk, mintha megfelelő, $\lambda = \frac{h}{p}$ hullámhosszú monokromatikus elektromágneses hullámot használnánk.**

   A **Debye-Scherrer-módszer** lényege, hogy ha monokromatikus síkhullám esik kristályporból préselt mintára, akkor az egyes kristályszemcsék térbeli rácsot képeznek. Egy-egy szemcsén az elhajlási kép annak köszönhetően jön létre, hogy amikor a beeső s´ ikhullámnak két szomszédos, egymástól d távolságra levő, párhuzamos kristálysíkról visszavert része találkozik, akkor közöttük $2d\sin\theta$ útkülönbség van, ahol θ a beeső nyaláb és a kristálysíkok szöge. Amikor ezzel az állandó útkülönbséggel a két síkról visszavert s´ ikhullám szuperponálódik, akkor intenzitás-maximumot a **Wulf[94] és Bragg[95]-féle feltétel** teljesülése esetén kapunk,

$$2d\sin\theta = n\lambda, \tag{A.32}$$

   ahol λ a hullámhossz és $n = 1, 2, \ldots$ (ld. 9. ábra).

   Mivel a kristályporból préselt mintában a kristályszemcsék orientációja teljesen véletlenszerű, ezért az elhajlási kép forgásszimmetrikus a beeső hullám hullámvektorára nézve. Az elhajlási kép koncentrikus körgyűrűkből áll: sötét és világos gyűrűk követik egymást a beeső nyaláb tengelyétől radiális irányban kifelé haladva a nyalábra merőleges megfigyelési síkban. Legyen a megfigyelési sík a mintától L távolságra, és nézzük az intenzitást a beeső nyaláb tengelyétől r távolságra. Itt a $\operatorname{tg}\alpha = r/L$ irányba szóródott hullámok ineterferenciáját észleljük. Ezek azok, amelyek a beeső nyaláb irányával $\frac{1}{2}\alpha = \theta$ szöget bezáró kristálysíkokról verődnek vissza. A kísérleti elrendezés olyan, hogy $\alpha \ll 1$, úgyhogy $2\theta = \alpha \approx r/L$ és $\sin\theta \approx \theta$. Ekkor a Wulf-Bragg-feltételből azok az r_n sugárértékek, amelyeknél intenzitás-maximumot észlelünk,

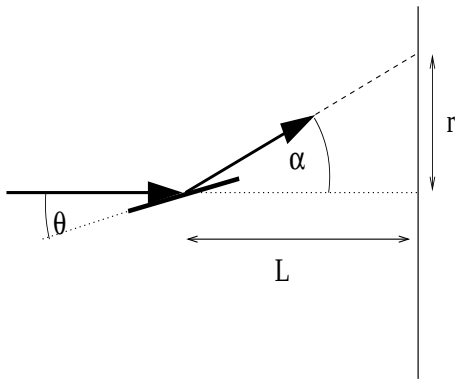
$$2d\frac{r_n}{2L} = n\lambda, \quad \Longrightarrow \quad r_n = n\lambda\frac{L}{d} \tag{A.33}$$

[92]Sir George Paget Thomson 1892-1975, angol) Clinton Joseph Davissonnal (1881-1958, amerikai) közösen megosztott fizikai Nobel-díjban részesült 1937-ben az elektronok kristályokon történő elhajlásának kísérleti felfedezéséért.

[93]Paul Scherrer (1890-1969, svájci) fizikus, aki azokkal a kutatásaival vált nemzetközileg elismertté, amelyeket a Röntgen-sugárzásnak kristályokon, folyadékokon gázokon való szóratása terén végzett.

[94]Theodor Wulf (1868-1946, német) fizikus és jezsuita páter, aki a sajt́ maga által tervezett és épített elektrométerrel 1910-ben felfedezte a kozmikus sugárzást.

[95]Sir William Henry Bragg (1862-1942, angol) és Sir William Lawrence Bragg (1890-1971, angol) megosztott fizikai Nobel-díjat kaptak 1915-ben a kristályszerkezetek Röntgen-sugarak segítségével történő analízise terén tett szolgálataikért.



10. ábra. A Debye-Sherrer-módszer sematikus ábrája.

egyenlőséget elégítenek ki.

Azonos, p nagyságú impulzussal beeső elektronok esetén az intenzitás-maximumoknak megfelelő sugárértékeket a tapasztalat szerint helyesen kapjuk meg a fenti, elektromágneses hullámokra vonatkozó formulából, ha abban a hullámhossz helyére a $\lambda = \frac{h}{p}$ de Broglie[96] hullámhosszat helyettesítjük.

A.1.3. Az atomok diszkrét gerjesztési energiái

Az atomok stabil alapállapotának létezése, a periódusos rendszer és az elemek kémiai tulajdonságai, mind olyan tények, amelyeket a klasszikus fizika nem tudott értelmezni. Ezekre majd később visszatérünk. Itt néhány olyan tapasztalatra hívom fel a figyelmet, amelyekből arra lehetett következtetni, hogy az atomok diszkrét gerjesztési energiákkal rendelkeznek.

1. *Az atomi spektrumok vonalas szerkezete. A Ritz-féle kombinációs elv.* **Az atomok által kibocsátott elektromágneses sugárzás tanulmányozása révén arra jöttek rá, hogy minden atom rá jellemző frekvenciákon bocsát ki elektromágneses sugárzást. Ezekhez a spektrumvonalakhoz tartozó energiák pedig sorozatokba rendezhetők, mint pl. a hidrogén-atom esetén a Balmer[97]-sorozat.** A sorozatba-rendezés azon alapul, hogy minden észlelt sugárzási frekvenciát elő lehet állítani olyan, szigorúan monoton csökkenő szám-sorozat tagjainak különbségeiként, ún. termek különbségeiként, ahol a sorozat tagjai meghatározott törvényszerűség szerint csökkennek, pl. a hidrogén-atom Balmer-sorozata esetén $\frac{1}{n^2}$ szerint, ahol $n = 1, 2, 3, \ldots$.

   A Ritz[98]-féle kombinációs elv azt mondta ki, hogy ismert spektrumvonalak energiáinak összeadása és kivonása révén újabb spektrumvonalakat

[96] Prince Louis-Victor Pierre Raymond de Broglie (1892-1987, francia) az 1929. évi fizikai Nobeldíj kitüntetettje, a díjat az elektronok hullámtermészetének felfedezéséért kapta.

[97] Johann Jacob Balmer (1825-1898, svájci) matematikus és fizikus a spektrumvonalak rendszerezése terén a kvantummechanika kifejlődése szempontjából alapvető fontosságú felismerést tett.

[98] Walter Ritz (1878-1909, német) matematikus és fizikus, aki sugárzáselmélettel és spektroszkópiával, valamint az ezekkel kapcsolatos matematikai problémákkal foglalkozott és felismerte a róla elnevezett kombinációs elvet.

lehet kombinálni. Az elv a gyakorlatban hasznosnak bizonyult újabb spektrumvonalak keresésében: meg lehetett előre mondani, hogy milyen frekvenciáknál várhatók újabb spektrumvonalak. Az elv hátterében az a feltevés áll, hogy minden spektrumvonalhoz tartozó $\hbar\omega$ energia két term, azaz két energia különbségeként állítható elő.

A magyarázatot akkor kapjuk meg, ha feltesszük, hogy az atomoknak diszkrét E_n energiájú állapotai vannak. Az $\omega_{n,m}$ körfrekvenciájú elektromágneses sugárzás kibocsátása annak a következménye, hogy az atom a magasabb energiájú E_m gerjesztett állapotából az alacsonyabban gerjesztett $E_n < E_m$ energiájú állapotába megy át; ekkor

$$\hbar\omega_{n,m} = E_m - E_n. \tag{A.34}$$

Ha megtaláltuk az $\omega_{m,l}$ spektrumvonalat és utána a $\omega_{n,l} = \omega_{n,m} + \omega_{m,l}$ összegfrekvenciának megfelelő vonalat is, akkor ezeket el tudjuk rendezni úgy, mint 3 darab energiaszint közötti összes lehetséges átmenetet, ahol $E_n < E_m < E_l$. Ugyanakkor, ha megtaláltuk előzőleg az $\omega_{n,m}$ és az $\omega_{n,l}$ átmeneteket, majd felfedezzük a különbségi frekvenciának megfelelő $\omega_{m,l} = \omega_{n,l} - \omega_{n,m}$ átmenetet, akkor szintén mondhatjuk, hogy megtaláltuk az atom 3 darab állapotának energiáját.

A klasszikus fizika nem ad magyarázatot arra, hogy az atomi állapotok energiája miért diszkrét. Sőt, mint arról a klasszikus elektrodinamika keretében beszéltünk, még azt sem tudja megmagyarázni, hogy a hidrogén-atom miért rendelkezik stabil alapállapottal. Ezekre a kérdésekre csak a kvantummechanika adott kielégítő magyarázatot.

Az atomi spektrumok vonalas szerkezetének első magyarázata **az atomok Bohr[99]-féle modellje** alapján történt. Ennek lényege, hogy az elektronok az atommag körül körpályán mozognak. A pályamozgáshoz tartozó impulzus azonban olyan, hogy a neki megfelelő de Broglie hullámhossz éppen $n > 0$ egész számszor férjen rá a pálya kerületére, mert így tud elektronállóhullám kialakulni:

$$n\frac{h}{p} = 2r\pi, \tag{A.35}$$

ahol p az elektron impulzusának nagysága, r a körpálya sugara. Másrészt a Coulomb[100]-erőnek kell biztosítania, hogy az elektron körpályán maradjon:

$$m\frac{v^2}{r} = m\frac{p^2}{m^2 r} = \frac{p^2}{mr} = \frac{Ze^2}{r^2}, \tag{A.36}$$

ahol m, ill. e az elektron nyugalmi tömege, ill. töltése, Z az atom rendszáma. Így

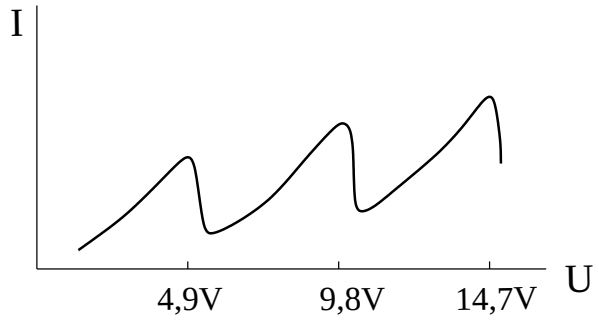
$$p = \frac{n\hbar}{r}, \qquad p^2 = \frac{mZe^2}{r}, \tag{A.37}$$

ahonnan az elektron impulzusa, az elektron pályájának sugara és az elektron energiája diszkrétnek adódik:

$$\begin{aligned} p_n &= \frac{mZe^2}{n\hbar}, \\ r_n &= \frac{n^2\hbar^2}{mZe^2}, \\ E_n &= -\frac{1}{2}\frac{Ze^2}{r_n} = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2 n^2} \equiv -R\frac{1}{n^2}. \end{aligned} \tag{A.38}$$

[99] Niels Henrik David Bohr (1885-1962, dán) fizikai Nobel-díjat kapott 1922-ben az atomok szerkezetének és az általuk kibocsátott sugárzásnak a kutatása terén elért eredményeiért.

[100] Charles Auguste de Coulomb (1736-1806, francia) fizikus méréseivel igazolta a róla elnevezett Coulomb-törvényt.



11. ábra. A Franck-Hertz-kísérletben megfigyelhető feszültség-áram karakterisztika.

Itt R az ún. Rydberg[101]-állandó. Az atomi spektrumvonalak olyan elektromágneses sugárzást jelentenek, ami akkor következik be, amikor az elektron egy magasabb energiaszintről alacsonyabb energiaszintre kerül. Az energiakülönbség úgy jelenik meg, mint a kibocsátott sugárzás energiakvantuma:

$$\hbar\omega = E_{n'} - E_n = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^{\,2}}\right), \qquad n' > n. \tag{A.39}$$

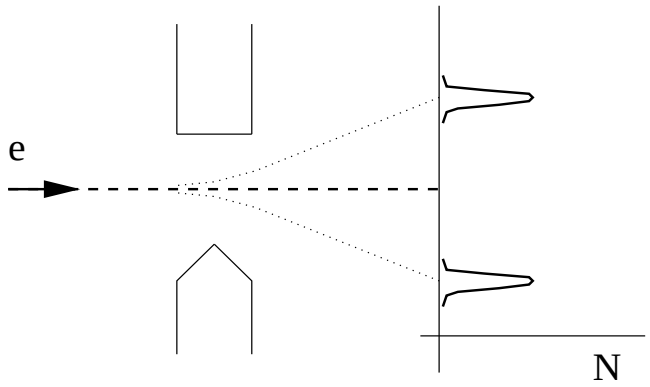
Ez a modell helyesn magyarázta a H-atom színképvonalait, nem adott azonban helyes magyarázatot a bonyolultabb atomok színképvonalaira.

2. *A Franck-Hertz kísérlet.* **A Franck és Hertz[102] által végzett kísérlet annak közvetlen bizonyítására szolgál, hogy az atomok diszkrét energiaadagokkal gerjeszthetők, azaz hogy az atomi állapotok energiái diszkrétek.**

   A kísérletben egy elektroncsövet higany-gőzzel töltenek meg, majd felveszik a feszültség-áram karakterisztikáját. A tapasztalat az, hogy az áram a feszültség függvényében szigorúan monoton növekszik, majd +4,9 V anódfeszültségnél visszaesik; aztán újra növekedni kezd és +9,8 V feszültségnél újra visszaesik. Végül a feszültséget tovább növelve, újabb növekedési szakasz és +14,7 V feszültségnél egy újabb visszaesés is megfigyelhető. A jelenséget azzal lehet magyarázni, hogy a higany-atomnak van egy gerjesztett állapota, amelynek az energiája 4,9 eV energiával nagyobb a higany-atom alapállapotának az energiájánál. Amíg az anódfeszültség nem éri el a 4,9 V-ot, addig az elektronok csak rugalmasan tudnak ütközni a higany-atomokkal, ugyanis nincsen elég energiájuk ahhoz, hogy gerjesszék azokat. Ezért ezen a feszültségszakaszon az elektronok energiaveszteség nélkül érik el az anódot, az áram a feszültséggel szigorúan monoton nő. Amikor az elektronoknak az elektroncsőre kapcsolt feszültségből származó energiája eléri ill. éppen meghaladja a 4,9 eV-ot, akkor rugalmatlan ütközések következnek be az elektronk és a higany-atomok között. Ezért azoknak az elektronoknak, amelyek rugalmatlanul ütköztek egy higany-atommal, nem lesz elég energiájuk, hogy elérjék az anódot, az áram lecsökken. A feszültséget tovább növelve az egyszer már egy higany-atommal rugalmatlanul ütközött elektronok újra kaphatnak a külső elektrosztatikus tértől annyi energiát, hogy elérjék az anódot, tehát az áram újra nő. A növekedés mindaddig tart, amíg az egyszer már rugalmatlanul ütközött elektronok újra fel tudnak venni újabb 4,9 eV energiát

[101] Johannes Robert Rydberg (1854-1919, svéd) fizikus vezette be a termek fogalmát.

[102] Az 1925. évi fizikai Nobel-díjat 1926-ban megosztva kapta meg James Franck (1882-1964, német-amerikai) és Gustav Ludwig Hertz (1887-1975, német) azoknak a törvényeknek a felfedezéséért, amelyek az elektronnak az atommal történő ütközését meghatározzák.



12. ábra. A Stern-Gerlach-kísérlet szemléltetése. A bejövő elektronnyaláb a mágnespofák közti inhomogén mágneses térben két nyalábra válik szét. A felfogó ernyőn a bejövő nyaláb tengelyére szimmetrikusan két helyen kapunk az N beütésszámban maximumot.

és így másodszor is tudnak rugalmatlanul ütközni egy higany-atommal. Az áram harmadik visszaesése a feszültség-áram karakterisztikán annak felel meg, hogy vannak elektronok, amelyek háromszor is tudnak a higany-atomokkal rugalmatlanul ütközni. Ezt a magyarázatot még az is igazolta, hogy azokon a szakaszokon, amikor az áram csökken, meg lehetett figyelni azt a, gerjesztett higany-atomoktól származó elektromágneses sugárzást, amelynek az ω körfrekvenciája kielégíti a $\hbar\omega = 4,9$ eV összefüggést. Ez a sugárzás azért jelenik meg, mert az elektronok által gerjesztett higany-atomok gerjesztett állapota nem stabil. Ezek a gerjesztett atomok elektromágneses sugárzás kibocsátása révén visszatérnek az alapállapotukba.

A.1.4. Az elektron spinjének felfedezése

Az elektron spinjének létezését, az elektron spinjének és mágneses momentumának kapcsolatát és az impulzusmomentum iránykvantáltságát igazoló kísérletekről beszélünk.

1. *A Stern és Gerlach kísérlete.* **Stern[103] és Gerlach[104] azt igazolták, hogy a mágneses dipólmomentum adott irányú vetülete kvantált.** A kísérletben ezüst-atomok nyalábját bocsátották át olyan térrészen, amelyben inhomogén mágneses tér uralkodott. Azt tapasztalták, hogy a térrészen való áthaladás után az ezüstnyaláb két nyalábra vált szét.

   Az ezüst-atomok $\vec{\mu}$ mágneses dipólmomentummal rendelkeznek. A mágneses dipólmomentumnak külső mágneses térben $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ potenciális energiája van, ahol $\vec{B}$ a mágneses indukció. A mágneses dipólusra ezért inhomogén mágneses térben zérustól különböző $\vec{F} = -\text{grad}\, U = \text{grad}\, (\vec{\mu} \cdot \vec{B})$ erő hat. Ha pl. a mágneses indukció a nyaláb

[103] Az 1943. évi fizikai Nobel-díjat 1944-ben adták át Otto Sternnek (1888-1969, német) egyrészt azért a hozzájárulásért a fizika fejlődéséhez, amit a molekula-nyalábok módszerének kifejlesztése terén tett, másrészt a proton mágneses momentumának a felfedezéséért.

[104] Walther Gerlach (1889-1979, német) fizikus, aki az Otto Sternnel 1920-ban, a Frankfurti Egyetemen közösen végzett kísérlet és a Stefan-Boltzmann-állandó pontos mérésekkel történő meghatározása révén vonult be a fizika történetébe.

irányára közelítőleg merőleges és csak a z-irányban változik számottevően, akkor az erő közelítőleg z-irányú és közelítőleg $F_z \approx \mu_z \frac{dB_z}{dz}$. Az ezüstnyalábban az atomok mágneses momentumai a z-tengelyhez képest véletlenszerűen állnak. Ezért azt várnánk, hogy a mágneses dipólmomentum z-irányú vetülete, μ_z a $[-\mu, +\mu]$ intervallumban tetszőleges értéket felvehet, s így az erő z-komponense az $F_z \in \left[-\mu \left|\frac{dB_z}{dz}\right|, \mu \left|\frac{dB_z}{dz}\right|\right]$ intervallumban folytonosan minden értéket felvehet. Ezért, ha a nyaláb áthalad a véges vastagságú térrészen, ahol az inhomogén mágneses tér uralkodik, akkor ki fog szélesedni. Ezzel szemben a tapasztalat azt mutatja, hogy az eredeti nyaláb irányára nézve szimmetrikusan, két nyalábot kapunk. Az egyes nyalábok eltérülésének mértéke olyan, mintha a mágneses dipólmomentum μ_z vetülete csak a $\mu_z = \pm\mu$ értékeket vehetné fel. Az egyik nyalábban azok az atomok maradnak, amelyeknek mágneses dipólmomentuma a z-tengelyhez képest ,,felfelé" (pozitív irányban) mutat, a másikban azok, amelyeknek a dipólmomentuma a z-tengelyhez képest ,,lefelé" (negatív irányban) mutat. Akárhogyan forgatjuk az inhomogén mágneses teret létesítő mágnespofákat a nyaláb tengelye körül, mindig ugyanazt tapasztaljuk.

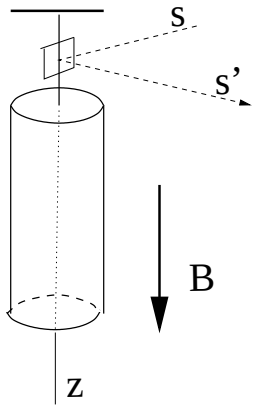
A Stern-Gerlach-kísérletből arra lehet következtetni, hogy a mágneses dipólmomentum tetszőleges irányú tengelyre vett vetülete kvantált. Az ezüstatomok esetén csak két értéket vehet fel.

Az alább ismertetésre kerülő Einstein-de Haas[105]-kísérlet eredményét is figyelembe véve, azt lehet mondani, hogy az ezüstatomok mágneses momentuma csak egyetlen elektron kompenzálatlan mágneses momentumától származik és nem annak pályamozgásából, hanem az elektron saját impulzusmomentumától. Ekkor viszont **a Stern-Gerlach-kísérlet eredménye azt is jelenti, hogy az elektron $\vec{s}$ saját impulzusmomentumának tetszőleges tengelyre vett vetülete csak 2 értéket, $s_z = \pm|\vec{s}|$ vehet fel.**

2. *Einstein és de Haas kísérlete.* **Az Einstein-de Haas-kísérlet annak bizonyítására szolgál, hogy az elektron mágneses momentuma saját impulzusmomentummal kapcsolatos. Egyúttal az is bizonyítást nyer, hogy az elektron saját impulzusmomentumától, azaz spinjétől származó mágneses momentum jól megkülönböztethető a pályamozgás pályaimpulzusmomentumától származó mágneses momentumtól, mert a két esetben kettes faktorral különbözik a mágneses momentum és az impulzusmomentum arányossági tényezője.**

   A kísérletben egy ferromágneses hengert vettek, amelyet torziós szálon függőlegesen felfüggesztettek a hossztengelye, a z-tengely mentén. Kezdetben a hengerben a mágneses momentumok, amelyek atomonként egy-egy darab elektron saját mágneses momentumától származnak, irányukat tekintve rendezetlenül helyezkedtek el az anyagon belüli hőmozgás miatt. Ezután erős, homogén, z-irányú külső mágneses teret kapcsoltak be, amely a hengert telítésig mágnesezte. A homogén mágneses térben valamennyi mágneses momentum beállt a potenciális energia minimumát jelentő, a külső mágneses térrel ellentétes irányba. Megvárták, amíg beállt a henger egyensúlyi állapota. Ekkor átfordították a mágneses indukcióvektor irányát, aminek következtében valamennyi atom mágneses momentuma ellentétes irányúvá vált. Ha a mágneses momentumokhoz impulzusmomentum is tartozik, akkor a kísérletben az eredetileg z-irányú impulzusmomentummal rendelkező pörgettyűk a mágneses indukcióvektor átfordítása után mind a z-tengellyel ellentétes irányba mutatnak. Ez z-irányú impulzusmomentum-változást jelent, amelynek hatására a hengernek el

[105] Wander Johannes de Haas (1878-1960, holland) fizikus és matematikus, aki leginkább a Shubnikov-de Haas-effektusról, a de Haas-van Alphen effektusról és az Einstein-de Haas-effektusról ismeretes.



13. ábra. Az Einstein-de Haas-kísérlet szemléltetése. Ha az erős $\vec{B}$ mágneses indukcióteret ellentétes irányba fordítjuk át, akkor a henger elfordul, és ezért a torziós szálra rögzített tükörre az S fénysugár más szög alatt esik be és megváltozik visszavert S' fénysugár iránya.

kell fordulnia. A kísérlet elvégzésekor valóban észlelték a henger elfordulását, ill. ennek megfelelően a torziós szál elcsavarodását. Ezzel beigazolódott, hogy az elektron mágneses dipólmomentuma impulzusmomentummal kapcsolatos. Arányosságot feltételezve a mágneses dipólmomentum és az impulzusmomentum között, a torziós szál torziós állandójának ismeretében az elfordulás szögéből meg lehetett határozni a két mennyiség közötti arányossági tényező értékét.

A kísérletben megállapítást nyert

(a) hogy az elektron mágneses momentumának kapcsolatban kell állnia valamilyen, az elektron által hordozott impulzusmomentummal;

(b) és hogy ez a kapcsolat lineáris;

(c) sőt hogy az arányossági tényező különbözik a pályaimpulzusmomentum és a mágneses momentum közötti, a klasszikus elektrodinamikából ismert arányossági tényezőtől, annak kétszerese.

Az elektron így megfigyelt mágneses momentuma tehát nem pályaimpulzusmomentummal kapcsolatos. Azt kell mondjuk, hogy az elektronnak nem pályamozgásból származó, úgynevezett saját impulzusmomentuma, spinje van.

Az Einstein-de Haas-kísérlet és a Stern-Gerlach-kísérlet eredményei alapján azt kell mondani, hogy **az elektronnak saját impulzusmomentuma van, amelyhez mágneses momentum is tartozik. Ezek egymással arányosak, de kvantumos mennyiségek, mert valamely z tengelyre vett vetületük csak kétféle értéket vehet fel. Az elektron saját impulzusmomentuma tehát iránykvantált, csak „felfelé” vagy „lefelé” mutathat egy tetszőleges tengelyhez képest.**

A.2. A kvantummechanika néhány további kísérleti bizonyítéka*

1. *Young-féle interferencia-kísérlet részecskékkel.* A fény áthaladása kettős résen olyan klasszikus kísérlet, amelyik a fény hullámtermészetét közvetlenül igazolja. Young[106] kísérlete perdöntő volt a Newton és Huygens közötti vita eldöntésében, hogy a fény részecske–, vagy hullám-természetű. A kísérlet eredménye mutatta, hogy interferenciaképet kapunk a kettős rés mögötti felfogó ernyőn, ami Huygens álláspontját és a fény hullám-természetét igazolta.

   Említettük, hogy szellemében hasonló kísérletet végzett Davisson és Germer elektronokból álló anyaghullámmal és sikerült igazolnia az elektronok hullám-természetét. Az anyaghullámok létének még közvetlenebb igazolása, ha elektronokat, vagy más részecskéket bocsátunk át kettős résen és megfigyeljük az átahaladó hullámban az elhajlási képet. Kvantummechanikai ismereteink birtokában mondhatjuk, hogy az anyaghullámok Young-féle kettős résen történő elhajlása azt igazolja, hogy az a két átmeneti amplitudó, hogy a részecske az F forrásból az 1-es, ill. a 2-es résen keresztül jut el a felfogó ernyő x pontjába, összeadódik:

$$A \sim \langle x|1\rangle\langle 1|F\rangle + \langle x|2\rangle\langle 2|F\rangle. \tag{A.1}$$

   Ezért annak a valószínűsége, hogy a részecskét az x pontban detektáljuk,

$$w(x) \sim |A|^2 \sim |\langle x|1\rangle\langle 1|F\rangle|^2 + |\langle x|2\rangle\langle 2|F\rangle|^2 + 2\ \mathrm{Re}\ \langle x|1\rangle^\star\langle 1|F\rangle^\star\langle x|2\rangle\langle 2|F\rangle.$$

   Ha a két rés egyenlő távolságra van a forrástól és a forrás mindkettő irányába azonos módon emittál elektronokat, akkor $|\langle 1|F\rangle|^2 = |\langle 2|F\rangle|^2 = w_F$, úgyhogy

$$w(x) \sim w_F(|\langle x|1\rangle|^2 + |\langle x|2\rangle|^2 + 2\ \mathrm{Re}\ \langle x|1\rangle^\star\langle x|2\rangle). \tag{A.2}$$

   Az átmeneti amplitudó az egyes résektől az ernyő x pontjába a megfelelő réstől az x pontig húzott egyenes szakasz mentén történő szabad mozgás klasszikus $S_{j,x}$ $(j = 1, 2)$ hatáskifejezésével adható meg,

$$\begin{aligned}
\langle x|j\rangle &\sim e^{\frac{i}{\hbar}S_{j,x}} = e^{\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}mv^2\Delta t_{j,x}} \\
&\sim e^{\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}mv\sqrt{L^2+(x-x_j)^2}} \sim e^{\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}mvL\left(1+\frac{(x-x_j)^2}{2L^2}\right)} \\
&\sim e^{\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}mvL}e^{\frac{i}{\hbar}\frac{mv(x-x_j)^2}{4L}},
\end{aligned} \tag{A.3}$$

   ahol L a felfogó ernyő és a kettős rés távolsága, m az elektron tömege, v az ernyőre merőleges sebessége. Felhasználtuk, hogy az ernyő és a kettős rés távolsága $L \gg |x - x_j|$ $(j = 1, 2)$. Ekkor a két rés az $x = 0$-ra szimmetrikusan helyezkedik el, $x_2 = -x_1 = s$, akkor

$$\begin{aligned}
w(x) &\sim w_F\left|e^{\frac{i}{\hbar}\frac{mv(x-x_1)^2}{4L}} + e^{\frac{i}{\hbar}\frac{mv(x-x_2)^2}{4L}}\right|^2 \\
&\sim w_F\left\{2 + 2\cos\left[\frac{mv}{4L\hbar}\left((x-x_1)^2 - (x-x_2)^2\right)\right]\right\} \\
&\sim w_F\left[2 + 2\cos\left(\frac{mv}{L\hbar}xs\right)\right] \sim 4w_F\cos^2\left(\frac{mv}{2L\hbar}xs\right).
\end{aligned} \tag{A.4}$$

   Az ernyő mentén mozgatva a detektort, azaz x-et változtatva, a beütésszámnak fő– és mellékmaximumai vannak.

[106] Thomas Young (1773-1829, angol) polihisztor, aki rendkívül jelentős tevékenységet fejtett ki az optikában. Említést érdemel a látásról szóló munkája. Felfedezte a hullámok interferenciáját (1801) és azt alkalmazta a fényre, pl. fényelhajlási jelenségek magyarázatára. A fény hullámtermészetének első, következetes hirdetője volt Newton korpuszkuláris fényelméletével szemben.

Újabban lényegében a Young-kísérletet ismételték meg fullerénekkel, a C_{60} és a C_{70} fullerénnel (M.Arndt, Nature 401 (1999) 680). Ebben az az érdekesség, hogy a szénnek ezek a kristályos módosulatai rendkívül nagyméretűek, átmenetet képeznek a mikrovilág és a makrovilág objektumai között. Kettősrés helyett nagyon finom beosztású, 100 nm-es rácsállandójú rácsot használtak. A kísérlet egyértelműen igazolta, hogy a fullerének a rácson elhajlási képet hoznak létre.

2. *A hidrogén-atom.* Korábban hidrogén-atom kapcsán részletesen tárgyaltuk, hogy a klasszikus fizika miért nem volt képes megmagyarázni, hogy a hidrogén-atomnak létezik stabil állapota. Arra is rámutattunk, hogy a kvantummechanika törvényei hogyan teszik lehetővé a stabil alapállapot létezését. Az elektron az őt a pozitív töltésű atommag felé vonzó Coulomb-erő és a határozatlansági elv összjátékaként állandó átlagos távolságra marad, és nem is gyorsul alapállapotban, hanem állóhullámszerűen veszi körül az atommagot.

   A kvantummechanika egyúttal természetes magyarázatát adja a hidrogén-atom és általában az atomok diszkrét energiájú kötött állapotainak.

3. *A periódusos rendszer felépítése és az elemek kémiai tulajdonságai.* Beszéltünk az elemek Mengyelejev-féle periódusos rendszeréről. Az atomok szerkezetének kvantummechanikai alapokon történő megértése, a molekulák szerkezetének tisztázása, a vegyérték és a kémiai kötés kvantummechnikai magyarázata, mind-mind a kvantummechanika helyességének bizonyítékai.

4. *Rabi-oszcilláció.* Helyezzük az elektron spinjét külső, időben változó $\vec{B}(t)$ indukciójú mágneses térbe. Az elektron Hamilton-operátora ekkor

$$\hat{H}(t) = -g_s \hat{\vec{s}} \cdot \vec{B}(t), \tag{A.5}$$

   ahol $\hat{\vec{s}} = \frac{1}{2}\hbar\hat{\vec{\sigma}}$. Elhagytuk a Hamilton-operátorból az elektronspin ,,sajátenergiáját" leíró, a továbbiak szempontjából érdektelen tagot. Alkalmazzunk olyan külső mágneses teret, amikor a mágneses indukció vektora a z-tengellyel adott szöget bezárva ,,precesszál" a z-tengely körül:

$$\vec{B}(t) = (B_1 \cos\omega t, B_1 \sin\omega t, B_0). \tag{A.6}$$

   Rabitól[107] (Phys. Rev. **51** (1937) 652) származik az alábbi ötlet: Válasszuk meg a mágneses indukció vektorának precessziós ω szögsebességét úgy, hogy az éppen megegyezzen az elektronspin Larmor-precessziója szögsebességével, ami a mágneses tér z-irányú, sztatikus komponense miatt lép fel. Ekkor az alkalmazott $\vec{B}(t)$ mágneses tér az elektron spinjét perioódikusan, rezonanciaszerűen forgatja a z-tengelyre merőlegesen, a z-tengelyhez képest ,,felfelé" és ,,lefelé" mutató spinállások között. Ez a **Rabi-oszcilláció.** A felismert jelenség szép igazolása egyrészt a kvantummechanikának, másrészt gyakorlati szempontból is nagyon jelentős. A Rabi-oszcilláció további fontos kísérleti módszerek alapjául szolgál:

   (a) **A magmágneses rezonancia módszere** (idegen szóval: **Nuclear Magnetic Resonance,** röviden **NMR**), amikor a külső mágneses tér az atommag spinjének Rabi-oszcillációját idézi elő. Ezen a jelenségen alapul az **NMR-spektroszkópia**[108]**,** ami ma már általánosan elterjedt **anyagvizsgálati módszer.**

[107] Isidor Isaac Rabi (1898-1988, amerikai) 1944-ben kapott fizikai Nobel-díjat azért a rezonanciamódszerért, amelyet az atommagok mágneses tulajdonságainak meghatározására fejlesztett ki.

[108] Az 1952. évi fizikai Nobel-díjat megosztva ítélték oda Felix Blochnak (1905-1983, svájci-amerikai) és Edward Mills Purcellnek (1912-1997, amerikai) részben azoknak az új módszereknek a kifejlesztéséért, amelyek precíziós magmágneses méréseket tesznek lehetővé, részben azokért a felfedezéseikért, amelyeket ezekkel a módszerekkel tettek.

(b) **Az orvosdiagnozstikában** általánosan elterjedten használják a **mágneses rezonanciás képalkotás**[109] módszerét az agy és más szervek képének előállítására (ld. http://physicsweb.org/article/news/7/10/3/1). A módszer szintén a magmágneses rezonancián, azaz az atommagok mágneses momentumainak Rabi-oszcillációján alapul. A mintáról azáltal sikerül két-dimenziós képeket alkotni, hogy inhomogén, azaz térbeli gradienssel rendelkező mágneses teret alkalmaznak. A képhez tartozó információ gyors begyűjtésére külön módszert fejlesztettek ki.

(c) Az eddig megvalósított **kvantumszámítógép vezérlése** is a Rabi-oszcilláción alapult (ld. pl. Papp Gy., Természettudományi Közlöny, 2003, 134. évf., 3. füzet, 103-106.; I.L. Chuang, N. Gershenfeld, M. Kubinec, Phys.Rev.Lett. **80** (1998) 3408).

Az elektron $|\chi(t)\rangle$ időtől függő spinállapota a

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\chi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\chi(t)\rangle \tag{A.7}$$

Schrödinger-egyenlet megoldása. Legyen a kezdeti feltétel a $t = 0$ időpillanatban a $|\chi(0)\rangle$ állapot. Akkor az időtől függő Schrödinger-egyenlet megoldása (A. Galindo, P. Pascual, *Quantum Mechanics II.,* (Springer, 1990)):

$$\begin{aligned} |\chi(t)\rangle &= \hat{U}(t)|\chi(0)\rangle, \\ \hat{U}(t) &= e^{-i\frac{1}{2}\omega t\hat{\sigma}_z}e^{-i\frac{1}{2}[(\omega_0-\omega)\hat{\sigma}_z+\omega_1\hat{\sigma}_x]t} \\ &= \left(\cos\frac{1}{2}\omega t0 - i\hat{\sigma}_z\sin\frac{1}{2}\omega t\right)\left(\cos\frac{1}{2}\Omega t0 - i\hat{\sigma}\,'\sin\frac{1}{2}\Omega t\right), \end{aligned} \tag{A.8}$$

ahol

$$\begin{aligned} \omega_0 = -g_sB_0, \qquad & \omega_1 = -g_sB_1, \\ & \Omega = \left[(\omega_0-\omega)^2+\omega_1^2\right]^{\frac{1}{2}}, \\ & \hat{\sigma}\,' = \frac{1}{\Omega}[(\omega_0-\omega)\hat{\sigma}_z+\omega_1\hat{\sigma}_x]. \end{aligned} \tag{A.9}$$

Itt Ω az úgynevezett Rabi-frekvencia, ω_0 pedig annak a Larmor-precessziónak lenne a szögsebessége, ami akkor következne be, ha a mágneses térnek az oszcilláló komponensei eltűnnének (ld. a 4.1.2. fejezetet).

Válasszuk a ,,felfelé" mutató $|+\rangle$ spinállapotot, mint kezdeti állapotot. Ekkor annak a valószínűsége, hogy t idő múlva a spin a ,,lefelé" mutató $|-\rangle$ állapotban van,

$$w_{\downarrow\leftarrow\uparrow} = \left|\langle-|\hat{U}(t)|+\rangle\right|^2. \tag{A.10}$$

Ez a valószínűség 1 akkor és csak akkor, ha teljesülnek a **Rabi-oszcilláció feltételei:**

(a) a **rezonanciafeltétel:** $\omega = \omega_0$, azaz $\Omega = |\omega_1|$, és

(b) az időpillanat kielégíti az

$$\Omega t = 2\pi\left(n+\frac{1}{2}\right), \quad n = 0, \pm1, \pm2, \ldots \tag{A.11}$$

feltételt.

[109] A 2003. évi fiziológiai vagy orvosi Nobel-díjat megosztva Paul Christian Lauterbur (1929-2007, amerikai) és Peter Mansfield (1933-, angol) kapták a mágneses rezonanciás képalkotás terén tett felfedezéseikért.

A spin ekkor úgynevezett Rabi-oszcillációt végez a $|+\rangle$ és a $|-\rangle$ állapotok között: Ω körfrekvenciával ide-oda billen. A rezonancia-feltételt kielégítő mágneses indukcióteret Rabi-féle térnek nevezzük. A Rabi-féle tér további előnye, hogy megfelelő ideig történő alkalmazásával a spint kívánt módon forgathatjuk a térben.

5. *Összefonódott állapotok.* **Az állapotok összefonódása** olyan kvantummechanikai jelenség, amikor két, megkülönböztethető állapotokkal rendelkező részecske állapota között sokkal szorosabb kapcsolat van, mint az a klasszikus fizika szerint lehetséges lenne. Nevezetesen, ha két – egymástól akár tetszőlegesen távol tartózkodó – részecske összefonódott állapotban van, és az egyik állapotát méréssel meghatározzuk, akkor a másik részecske állapota is ismert lesz. Pl. az összefonódott állapot lehet olyan, hogy ha az egyik részecske spinje felfelé mutat, akkor a másiké bizonyosan lefelé mutat. Az összefonódott állapotok a kvantuminformatika és a kvantumszámítógépek szempontjából kulcsfontosságúak. Az összefonódott, nem szeparálható állapotok természetéről már beszéltünk a 5.1 fejezetben. Láttuk, hogy lényegében arról van szó, hogy megkülönböztethető állapotok lineáris szuperpozícióját kell előállítani. A már említett példánál maradva, amikor két részecskénk van fel- vagy lefelé mutató spinekkel, azaz $|\uparrow\rangle$ vagy $|\downarrow\rangle$ állapotban, akkor négy lehetséges bázisállapot van a két-részecskés rendszer spinállapotainak a Hilbert-terében:

$$|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \quad |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle, \quad |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \quad |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle, \tag{A.12}$$

ahol az első, ill. a második tényező rendre az egyik, ill. a másik részecske állapotterében van, és

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_z|\uparrow\rangle &= +|\uparrow\rangle, \quad \hat{\sigma}_z|\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle, \\ \hat{\vec{\sigma}}^{\,2}|\uparrow\rangle &= |\uparrow\rangle, \quad \hat{\vec{\sigma}}^{\,2}|\downarrow\rangle = |\downarrow\rangle. \end{aligned} \tag{A.13}$$

Könnyű megmutatni közvetlen számolással, hogy az eredő spin $\hat{\vec{\Sigma}} = a(\hat{\vec{\sigma}}_1 + \hat{\vec{\sigma}}_2)$, pontosabban $\hat{\vec{\Sigma}}^{\,2}$ és $\hat{\Sigma}_z$ közös $|S, M\rangle$ sajátállapotai[110]:

S	M	sajátállapot
$2a$	$-2a$	$\|\downarrow\rangle \otimes \|\downarrow\rangle$
$2a$	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\rangle \otimes \|\downarrow\rangle + \|\downarrow\rangle \otimes \|\uparrow\rangle)$
$2a$	$2a$	$\|\uparrow\rangle \otimes \|\uparrow\rangle$
0	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\rangle \otimes \|\downarrow\rangle - \|\downarrow\rangle \otimes \|\uparrow\rangle)$

A fenti példánkban az $M = 0$ eredő spinvetületű állapotok összefonódott állapotok, amelyek a kvantummechanikai lineáris szuperpozíció elvének köszönhetik létüket. Tényleges fizikai megvalósításuk a kvantummechanika egyik szép kísérleti bizonyítéka. Az egyes részecskék spinállapotainak összefonódásáról kísérletileg is meggyőződhetünk. Ha megmérjük az egyik részecske spinvetületét, akkor a mérés $\frac{1}{2}$, ill. $\frac{1}{2}$ valószínűséggel eredményez fel-, ill. lefelé mutató spinállást. A mérés után azonban a másik részecske rendre bizonyosan lefelé, ill. felfelé mutató spinállásban lesz megtalálható. Ez a korreláció akkor is fennáll, ha a két részecske térben tetszőlegesen távol van egymástól.

Az utóbbi n
ehány évben az összefonódott állapotok kísérleti megvalósítása terén jelentős előrelépés történt. Kutatás folyik egyrészt azon a területen, hogy milyen messzire lehet egymástól eltávolítani két, összefonódott spinállapotú részecskét, anélkül, hogy a környezet ,,szétrombolná"

[110] Elektronok esetén $a = \frac{1}{2}$, fotonok esetén $a = 1$. A fotont azért tekinthetjük a spin tekintetében két-állapotú rendszernek, mert $1\hbar$ spinje csak az impulzussal egyező vagy azzal ellentétes irányba mutathat, mert a foton nyugalmi tömege zérus.

ezt az állapotot. Ez azért érdekes, mert a kvantummechanikai állapot lemásolásához (kvantumteleportáció) és kvantuminformatikai módszerrel titkosított üzenetek továbbításához van rá nagy szükség. Másik fontos kutatási terület a több-részecskés összefonódott állapotok előállítása, amire a tervbe vett kvantumszámítógépek megvalósításához lenne szükség. Különösen fontos lenne kubiteknek szilárdtestekben történő realizációja és ilyen kubitek összefonódott állapotainak létrehozása, ill. ilyen kubitek vezérlése.

6. *Bose-kondenzátumok interferenciája.* Ugyancsak a kvantummechanika kísérleti bizonyítékai közé sorolhatjuk a Bose-kondenzátumok interferenciájának megfigyelését, amiről korábban már részletesen beszéltünk.

7. *Az elektronmikroszkóp* és az úgynevezett *pásztázó alagútmikroszkóp* Az *elektronmikroszkóp*[111] és az úgynevezett *pásztázó alagútmikroszkóp*[112] működése a kvantummechanika alapjaival kapcsolatos. Az **elektronmikroszkóp** működése azon alapul, hogy az elektronok anyaghullámként viselkednek. Az elektronnyalábot ugyanúgy lehet alkalmas elektromágneses terekkel kezelni, mint az optikában a fényt lencsékkel és tükrökkel, és ezt fl lehet használni arra, hogy elektronokkal meg-, ill. átvilágított tárgyról képet alkossunk. Az **elektronoptika** foglalkozik azon elektromágneses berendezések tervezésével, amelyek lencseként, tükörként hatnak az elektronokra. A **pásztázó alagútmikroszkóp** más elven működik: az alagúteffektust hasznosítja, és – mint arról már volt szó a 4.2.12 fejezetben – ennek az effektusnak nincsen klasszikus fizikai megfelelője. Mind az elektronmikroszkópnak, mind a pásztázó alagútmikroszkópnak a léte, működése szorosan összefügg a kvantummechanika alapjaival. Működésük annak fényes bizonyítéka, hogy a kvantummechanika helyes fizikai elmélet.

   Az elektronmikroszkóp kifejlesztése Ruska korai munkájával kezdődött, amelyet, mint a Berlin-i Műszaki Egyetem fiatal hallgatója végzett az 1920-as évek végén. Rájött, hogy egy mágneses tekercs lencseként hathat az elektronokra, és egy ilyen elektronlencsét fel lehet használni arra, hogy képet alkossunk az elektronokkal besugárzott tárgyról. Két elektronlencwse segítségével megépítette az első, nagyon egyszerű elektronmikroszkópot. A részletek további tökéletesítése után végül 1933-ra építette meg az első olyan elektronmikroszkópot, amely tulajdonságaiban felülmúlta az optikai mikroszkópokat. Az elektronmikroszkópos vizsgálati módszerek a folyamatos fejlesztések révén ma már a tudomány számos területére behatoltak, mint pl. az anyagtudományba, a biológiába és az orvostudományba. Az elektronmikroszkóp fő előnye, hogy a látható fény hullámhosszánál kisebb méretű szerkezetek vizsgálhatók a segítségével. Azonban még ez sem elég ahhoz, hogy az anyag atomos szerkezetét az elektronmikroszkópos képen láthatóvá tegyük. Erre a pásztázó alagútmikroszkóp nyitotta meg az utat.

   A pásztázó alagútmikroszkóp nem hagyományos értelemben vett mikroszkóp, amely képet alkot. Egy tűt mozgatunk a vizsgált tárgy felülete fölött, attól adott távolságban, ezzel a tűvel pásztázzuk a tárgy felületét. A tű felülettől mért távolságát az alagüteffektus révén szabályozzuk. A tű hegye és a felület közti elektromos potenciálkülönbség következtében a felület és a tű között az alagúteffektus révén áram folyik, annak dacára, hogy nem érintkeznek. Az áramerősség olyan erősen függ a távolságtól, hogy azt kb. 10^{-7}cm-es állandó értéken lehet tartani, ami kb. kétszeres atomi átmérőnek felel meg. A tű nagyon hegyes, egyetlen atom alkotja a hegyét. Ezáltal a pásztázott felület legkisebb egyenetlenségét is nyomon lehet követni. Feljegyezve a pásztázás során a tű helyzetének változásait, a felület

[111] Ernst Ruska (1906-1988) 1986/ban megosztott fizikai Nobel-díjban részesült az elektronoptikában folytatott alapozó munkáságáért és az első elektronmikroszkóp megtervezéséért.

[112] Az 1986. évi fizikai Nobel-díj másik két díjazottja egynegyed-egynegyed arányban Gerd Binnig (1947-) és Heinrich Rohrer (1933-), akik a pásztázó alagútmikroszkóp megtervezéséért kapták a megtisztelő elismerést.

szerkezetét atomról atomra haladva tanulmányozhatjuk. Binnig és Rohrer érdeme, hogy nemcsak az ötletük eredeti, hanem technikai megoldást is tudtak adni azokra a problémákra, amelyekkel ennek a precíziós műszernek a megépítése során szembe kellett nézniük.

8. *A kvantált Hall-effektus* **A kvantált Hall-effektus** szintén olyan jelenség, ami akvantummechanika működésének bizonyítéka. A klasszikus elektrodinamika szerint is fellép Hall-effektus, ebben azonban nincsen semmi „kvantumos". Ha vezetőn áram foltik át és az áramra merőleges irányban mágneses teret alkalmazunk, akkor a vezetőnek az áram és a mágneses tér irányára egyaránt merőleges felületei között potenciálkülönbség jön létre, amelynek oka hogy a Lorentz[113]-erő hatására a v driftsebességgel áramló elektronok eltérülnek. Az eredeti áramirányra és a mágneses indukció térre egyaránt merőleges oldallapok közti feszültség, a Hall[114]-feszültség $\mathcal{E}_H = vB\ell$, ahol B amágneses indukció nagysága, és ℓ a szóbanforgáo oldallapok távolsága. Az $i = fv$ áramerősség (f az eredeti áramirányra merőleges vezetőkeresztmetszet) és az $\mathcal{E}_H$ Hall-feszültség hányadosa, pontosabban a Hall vezetőképesség, $\sigma_H = i\ell/\mathcal{E}_H = i/(vB) = f/B$ a mágneses indukciónak szigorúan monoton csökkenő függvénye. Az effektus közönséges fémekben és félvezetéH okben lép fel és a fenti, klasszikus elektrodinamikán alapuló magyarázat kielégítő a tapasztalat szerint.

   Egészen új jelenség mutatkozik azonban, ha a Hall-effektust **kétdiemnziós elektronrednszerekben** vizsgáljuk. Ezek olyan anyagok, amelyekben az elektronok egy nagyon vékony rétegben, lényegében egy felületen tudnak csak mozogni, pl. egy vezető és egy félvezető közötti határfelületen. Ilyen két-dimenzió rendszerek nem fordulnak elő a Természetben, de mesterségesen előállíthatók a félvezető elektronikában használatos módszerekkel. A **kvantált Hall-effektus** lényege, hogy ilyen két-dimenziós elektronrendszerekben a Hall-vezetőképesség a mágneses indukció függvényében nem folytonosan, hanem lépcsős függvényként változik, csak a diszkrét értékeket vehet fel, azaz kvantált. von Klitzing[115] méréseivel (1980 körül) bebizonyította, hogy a Hall-vezetőképesség e^2/h egész számú többszöröse, ahol e az elektron töltésének nagysága, h a Planck-állandó. Azt találta, hogy a Hall-vezetőképesség és az e^2/h „kvantum" hányadosa valamelyik 1, 2, ... egész számtól nem tér el jobban, mint 10^{-7}. A „kvantálási szabály" ilyen rendkívüli pontosságú teljesedése teszi lehetővé, hogy az elemi Hall-ellenállást hitelesítő standardként lehessen használni az ellenállásmérésben. Egyúttal lehetővé teszi az e^2/h állandó nagyon nagy pontosságú meghatározását is, aminek az atom- és részecskefizika szempontjából van nagy jelentősége.

   További nagy érdeklődést kiváltó fejlemény volt az 1980-as évek elején a **tört Hall-effektus** felfedezése a Bell Laboratóriumban, amikor azt találták, hogy a Hall-vezetőképesség bizonyos esetekben e^2/h nem egészsámszorosa is lehet: 1/3, 2/3, 4/3, 5/3, 2/5, 3/5, 4/5, 2/7,stb.

   A kvantált Hall-effektusnak lényegében az az oka, hogy nagyon alacsony hőmérsékleten az elektronok közötti ütközések elhanyagolhatók, és hogy az egymással kölcsön nem ható elektronok ekkor a két-dimenziós vezetőre merőlegesen alkalmazott erős homogén mágneses térben diszkrét energiaállapotokkal rendelkeznek. Az erre vonatkozó elméleti megfontolás Landautól[116] (1930) származik. Az elektronoknak a homogén mágneses térben felvett

[113]Hendrik Antoon Lorentz (1853-1928) és Pieter Zeeman (1865-1943) 1902-ben fizikai Nobel-díjban részesültek azon rendkívüli szolgálataik elismeréseként, amelyeket a mágnességnek a sugárzási jelenségekre gyakorolt hatásának kutatásával végeztek. Lorentz munkásságából kiemelkedik az anyag róla elnevezett elektronelmélete, a Zeeman-effektus elméleti magyarázata, valamint a relativitáselméletet mintegy előkészítő Lorentz-Fitzgerald-féle kontrakció gondolata és a Lorentz-transzformáció felfedezése.

[114]Edwin Herbert Hall (1855-1938) fizikus 1879-ben fedezte fel a később róla elnevezett jelenséget.

[115]Klaus von Klitzing (1943-) 1985-ben fizikai Nobel-díjban részesült a kvantált Hall-effektus felfedezéséért.

[116]Lev Davidovics Landau (1908-1968) fizikai Nobel-díjban részesült a szilárdtestekre, különös

diszkrét energiáit **Landau-nívóknak** nevezik. A tört Hall-effektus egy sokkal bonyolultabb jelenség, amelyben az elektronok közötti kölcsönhatás kellő erősséges is fontos szerepet játszik.

B. Várható érték, szórásnégyzet

Ha dobókockával dobunk, akkor a dobásnak hatféle lehetséges kimenetele lehet: a felfelé elhelyezkedő lapon kaphatunk 1-est, 2-est, ... és 6-ost. Ha ,,tisztességesen" játszunk, akkor N-szer egymás után függetlenül elvégzett dobási kísérletben mindegyik eredmény nagyjából azonos számú alkalommal következik be. Ha dobások N száma nagyon nagy, akkor az egyes eredmények gyakorisága kb. $N/6$. A dobókockával való dobás egy lehetséges, speciális megvalósítása annak, amit a matematikusok **véletlen kísérletnek** neveznek: olyan kísérlet, amelynek többféle lehetséges eredménye van, amelyek véletlenszerűen következnek be. Ha N független, egymást követő, azonos kísérletben a k-adik eredmény N_k-szor következett be, akkor azt mondjuk, hogy ebben a N kísérletből álló kísérletsorozatban a **k-adik eredmény gyakorisága** N_k, és **a k-adik eredmény relatív gyakorisága** N_k/N. Ha $N \to \infty$ határesetben létezik a relatív gyakoriság határértéke,

$$\lim_{N\to\infty} \frac{N_k}{N} = w_k, \tag{B.14}$$

akkor azt mondjuk, hogy **a véletlen kísérletben a k-adik eredmény w_k valószínűséggel következik be.** A gyakoriságok definíciójából következik, hogy $\sum_k N_k = N$, ha az összegzés az összes lehetséges eredményre kiterjed, aminek következménye, hogy a megfelelő relatív gyakoriságok összege $\sum_k \frac{N_k}{N} = 1$, ill. hogy nagyszámú kísérlet határesetében

$$\sum_k w_k = 1. \tag{B.15}$$

Ne felejtsük el, hogy az összes lehetséges eredményre történő összegzést jelenti a $\sum_k$ szimbólum. (Ebben a fejezetben végig ezt a jelölést fogjuk használni.)

Hogyan győződne meg a fizikus arról, hogy létezik ez a valószínűség? Úgy, hogy egymás után $M \gg 1$ darab, független kísérletsorozatot végezne, amelyek rendre $N^{[1]}$, $N^{[2]} > N^{[1]}, \ldots, N^{[M]} > N^{[M-1]}$ darab véletlen kísérletből állnak, és megfigyelné, hogy az egymást követő kísérletsorozatokban észlelt relatív gyakoriságok minden határon túl növekvő M és $N^{[M]}$ esetén egyre jobban megközelítik a w_k értéket. Egy másik lehetséges megfigyelése a valószínűség létezésének, hogy a M darab kísérletsorozatban mindig ugyannannyi, $N \gg 1$ a kísérletek száma, és felveszi a fizikus azt a hisztogrammot, ami az egyes relatív gyakoriságoknak a kísérletsorozatokban történő bekövetkezési gyakoriságát ábrázolja. Ha azt találja,

tekintettel pedig a folyékony héliumra vonatkozó úttörő elméleti munkásságáért.

hogy éles maximuma van a hisztogrammnak a k-adik eredmény relatív gyakoriságának valamely r értéke körül, akkor ezt az értéket fogja azonosítani a w_k valószínűséggel.

Visszatérve a kockadobásra, azok a k egész számok, amelyeket a dobás eredményeként kaphatunk (az $1, 2, \ldots, 6$), úgy foghatók fel, mint egy x valószínűségi változó lehetséges értékei, amely ezeket az értékeket jól meghatározott w_k (példánkban $w_k = 1/6$) valószínűséggel veszi fel. A matematikai vélet kísérlet különböző lehetséges eredményei egy **valószínűségi változó** lehetséges értékeivel azonosíthatók. A **véletlen változó olyan változó, amelyik véletlenszerűen vehet fel különböző lehetséges értékeket, és az egyes lehetséges értékeit jól meghatározott valószínűséggel veszi fel.** Aszerint, hogy a véletlen változó a lehetséges értékeit milyen számhalmazon veszi fel, beszélhetünk diszkrét és folytonos valószínűségi változóról. A diszkrét valószínűségi változó csak diszkrét értékeket vehet fel, amelyeknek diszkrét pontok felelnek meg a számegyenesen. A folytonos valószínűségi változó folytonosan vehet fel számértékeket a számegyenes valamely intervallumában, vagy esetleg az egész számegyenesen.

Foglalkozzunk először a diszkrét valószínűségi változó esetével, jelöljük x-szel. Ezt avval jellemezhetjük kimerítően, hogy megmondjuk, milyen lehetséges x_k diszkrét értékeket milyen w_k valószínűséggel vesz fel. A valószínűségi változót azonban sokszor nem jellemezzük kimerítően, hanem csak néhány tulajdonságát állapítjuk meg. Az egyik ilyen tulajdonsága **a valószínűségi változó várható értéke**, ami nem más, mint a lehetséges értékeknek a megfelelő bekövetkezési valószínűségekkel súlyozott átlaga:

$$\bar{x} = \sum_k w_k x_k. \tag{B.16}$$

A várható érték tehát köznyelven szólva a véletlen változó átlagos értéke.

Az egyedi véletlen kísérletek eredményei azonban jobban vagy kevésbé k̈lönbözhetnek a várható értéktől. Az átlagos eltérés jellemzésére vezetjük be a **szórásnégyzet** fogalmát, ami nem más, mint a véletlen változó értékének a várható értéktő való négyzetes eltérésének a várható értéke:

$$\Delta^2 x = \overline{(x - \bar{x})^2} = \sum_k w_k (x_k - \bar{x})^2. \tag{B.17}$$

A definícióból rögtön következik, hogy a szórásnégyzet nem más, mint a véletlen változó négyzete várható értékének és a várható értéke négyzetének a különbsége:

$$\Delta^2 x = \overline{x^2} - (\bar{x})^2. \tag{B.18}$$

A bizonyítás igen egyszerű:

$$\begin{aligned} \Delta^2 x &= \sum_k w_k (x_k - \bar{x})^2 = \sum_k w_k [x_k^2 - 2x_k\bar{x} + (\bar{x})^2] = \overline{x^2} - 2\bar{x}\sum_k w_k x_k + (\bar{x})^2 \sum_k w_k \\ &= \overline{x^2} - 2(\bar{x})^2 + (\bar{x})^2 = \overline{x^2} - (\bar{x})^2. \end{aligned} \tag{B.19}$$

Általában az x véletlen változó tetszőleges $f(x)$ függvénye is véletlenszerűen veszi fel az értékét, s ennek várható értéke

$$\overline{f(x)} = \sum_k w_x f(x_k), \tag{B.20}$$

ill. szórásnégyzete

$$\Delta^2 f = \sum_k w_x [f(x_k) - \overline{f(x)}]^2. \tag{B.21}$$

Tekintsük most a folytonos x valószínűségi változó esetét. Ezt avval tudjuk kimerítően jellemezni, hogy megmondjuk, mi annak a $P(x \leq x')$ valószínűsége, hogy olyan x értéket vesz fel, amely nem nagyobb, mint egy előre tetszőlegesen megadott x' valós szám. Így értelmezzük az x valószínűségi változó $F(x') = P(x \leq x')$ eloszlásfüggvényét, ha megadjuk a $P(x \leq x')$ valószínűséget, mint az x' függvényét. Vegyük észre, hogy ez a definíció mindig értelmes, akkor is, ha az x változó a számegyenesnek csak egy véges intervallumában vesz fel értékeket. A folytonos véletlen változót avval is jellemezhetjük kimerítően, ha megadjuk, hogy tetszőleges infinitezimális $(x, x+dx)$ intervallumban milyen valószínűséggel veszi fel az értékeit,

$$dw(x) = F(x + dx) - F(x). \tag{B.22}$$

Ha az $F(x)$ eloszlásfüggvény differenciálható, (vagy legalább szakaszonként differenciálható), akkor (legalább szakaszonként) értelmezhetjük az úgynevezett $\rho(x)$ **valószínűségi sűrűség-függvényt** a

$$dw(x) = \rho(x)dx \tag{B.23}$$

módon, úgyhogy **a valószínűségi sűrűség-függvény az eloszlás-függv eny első deriváltja:**

$$\rho(x) = \frac{dF(x)}{dx}. \tag{B.24}$$

Az eloszlás-függvény definíciójából következik, hogy az $F(x)$ függvény alulról és felülről korlátos,

$$0 \leq F(x) \leq 1, \tag{B.25}$$

monoton növekvő és

$$F(-\infty) = 0, \quad F(+\infty) = 1, \tag{B.26}$$

A valószínűségi sűrűség definíciójából következik, hogy nem negatív, $\rho(x) \geq 0$, integrálható és

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)dx = 1. \tag{B.27}$$

Ha a folytonos véletlen változó csak az $[a, b]$ véges inervallumon vesz fel értékeket, az eloszlás-függvény és a sűrűség-függvény értelmezési tartományát akkor is kiterjeszthetjük az egész valós számegyenesre. Ekkor értelemszerűen $\rho(x) = 0$ az $[a, b]$

intervallumon kívüli pontokban, az intervallum kezdeti és végső pontjában pedig az értékét rendre az eloszl
'as-függvény jobb-, ill. baloldali deriváltjával azonosíthatjuk. Az eloszlás-függvényt visszaállíthajuk a valószínűségi sűrűség-függvényből,

$$F(x) = \int_{-\infty}^{x} \rho(x')dx'. \tag{B.28}$$

Az eloszlás-, és a sűrűség-függvény megadása kimerítően jellemzi a folytonos valószínűségi változót. Sokszor elegendő azonban a várható értékkel és a szórásnégyzettel történő (általában részleges) jellemzés. A várható érték definíciója:

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x dw(x) = \int_{-\infty}^{\infty} x\rho(x)dx. \tag{B.29}$$

A szórásnégyzet definíciója:

$$\Delta^2 x = \overline{(x-\bar{x})^2} = \int_{-\infty}^{\infty} (x-\bar{x})^2 \rho(x)dx. \tag{B.30}$$

Most is érvényes az alábbi azonosság:

$$\Delta^2 x = \overline{x^2} - (\bar{x})^2 = \int_{-\infty}^{\infty} x^2\rho(x)dx - \left(\int_{-\infty}^{\infty} x\rho(x)dx\right)^2. \tag{B.31}$$

A folytonos x véletlen változó tetszőleges („kellően jó viselkedésű") $f(x)$ függvényének a várható értéke

$$\bar{f} = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\rho(x)dx, \tag{B.32}$$

ill. szórásnégyzete

$$\Delta^2 f = \int_{-\infty}^{\infty} [f(x) - \bar{f}]^2 \rho(x)dx. \tag{B.33}$$

Az x diszkrét valószínűségi változó **egyenletesen oszlik el** az értékhalmazán, ha minden lehetséges x_k értéket azonos $w_k = w$ valószínűséggel vesz fel. Tegyük fel, hogy az értékhalmaz K darab (páronként különböző) diszkrét értéket tartalmaz, akkor $1 = \sum_{k=1}^{K} w_k = w\sum_{k=1}^{K} 1 = Kw$ miatt az egyes lehetőségek valószínűsége $w = 1/K$.

Az x folytonos valószínűségi változót **egyenletes eloszlásúnak nevezzük** a véges $[a, b]$ intervallumon, ha annak a valószínűsége, hogy az adott intervallum tetszőleges $\ell \leq L = b - a$ hosszúságú, tetszőleges elhelyezkedésű részintervallumán vesz fel értéket, az ℓ/L. Ez azt jelenti, hogy az egyenletes eloszlású valószínűségi változó sűrűség-függvénye:

$$\rho(x) = \begin{cases} 0, \text{ha}, x \notin [a, b] \\ \frac{1}{L}, \text{ha}, x \in [a, b] \end{cases} \tag{B.34}$$

azaz az $[a, b]$ intervallumban állandó, az $[a, b]$ intervallumon kívül pedig zérus értéket vesz fel. Az eloszlás-függvény:

$$F(x) = \int_{-\infty}^{x} dx' \rho(x') = \begin{cases} 0, \text{ha}, x < a \\ \frac{x-a}{L}, \text{ha}, x \in [a, b] \\ 1, \text{ha}, x > b \end{cases} . \tag{B.35}$$

Az x folytonos valószínűségi változót normális –, vagy Gauss-eloszlásúnak nevezzük, ha a sűrűség-függvénye egyre noramált Gauss-függvény,

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}. \tag{B.36}$$

Ennek az eloszlásnak két darab valós, folytonos paramétere van, $\sigma > 0$ és $x_0 \in (-\infty, +\infty)$. Az eloszlás függvény az úgynevezett **hiba-függvény,**

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{x} e^{-\frac{(x'-x_0)^2}{2\sigma^2}} dx' \tag{B.37}$$

nem írható fel zárt alakban. Teljesül a sűrűség-függvényektől elvárt

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} dx = 1 \tag{B.38}$$

feltétel (ld. a C. Függeléket). A normális eloszlás két paraméterének közvetlen jelentése van. A normális eloszlású valószínűségi változó várható értéke

$$\bar{x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} dx = x_0, \tag{B.39}$$

a szórásnégyzete pedig

$$\Delta^2 x = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} (x - x_0)^2 e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} dx = \sigma^2. \tag{B.40}$$

A kifejezésekben sereplő integrálok könnyen kiszámolhatók a C Függelékben mutatott módszerekkel. Mivel ez a két paraméter egyértelműen meghatározza a Gauss-eloszlást, elmondhatjuk, hogy a normális eloszlás olyan speciális eloszlás, amelyet a várható érték és a szórásnégyzet együttvéve már kimerítően jellemez.

C. Gauss-integrál*

A Gauss-integrálok sok kvantummechanikai feladatban előfordulnak, ill. a normális eloszlással kapcsolatos valószínűség-számítási feladatokban is. Ismerkedjünk meg ezek kiszámolásának módjával.

1. A legegyszerűbb Gauss-integrál

$$I(a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \tag{C.41}$$

ahol $a > 0$ valós paraméter. Vegyük észre, hogy az integrandus pozitív, aminek következtében $I(a) > 0$. Képezzük az integrál négyzetét és a két integrál szorzatát értelmezzük úgy, mint az (x, y) 2-dimenziós S síkra történő integrálást,

$$I^2(a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-ay^2} = \int_S dx\ dy\ e^{-a(x^2+y^2)} \tag{C.42}$$

Hajtsunk végre integráltranszformációt, térjünk át az S síkon az (x, y) Descartes-koordinátákról az (r, φ) síkbeli polárkoordinátákra,

$$x = r\cos\varphi, \qquad y = r\sin\varphi. \tag{C.43}$$

A változó-transzformáció Jacobi-mátrixának determinánsa

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial \varphi} & \frac{\partial y}{\partial \varphi} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -r\sin\varphi & r\cos\varphi \end{vmatrix} = r \tag{C.44}$$

úgyhogy az új változókban az S síkra vett integrál

$$I^2(a) = \int_S |J| e^{-ar^2} dr d\varphi = \int_0^{\infty} dr \int_0^{2\pi} d\varphi r e^{-ar^2} = 2\pi \int_0^{\infty} dr\ r e^{-ar^2} \tag{C.45}$$

Vegyük észre, hogy a jobb oldalon álló integrál integrandusa lényegében az e^{-ar^2} függvény r szerinti deriváltja,

$$I^2(a) = \frac{2\pi}{-2a} \int_0^{\infty} dr\ \frac{\partial e^{-ar^2}}{\partial r} = \frac{2\pi}{-2a}(-1) = \frac{\pi}{a}. \tag{C.46}$$

Figyelembe véve, hogy $I(a) > 0$, innen már adódik, hogy $I(a) = \sqrt{\pi/a}$.

2. Ha az integrandus páratlan kitevős monom és a Gauss-függvény szorzata, akkor

$$I_{2n+1}(a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x^{2n+1} e^{-ax^2} = 0, \quad n \geq 0,\ a > 0, \tag{C.47}$$

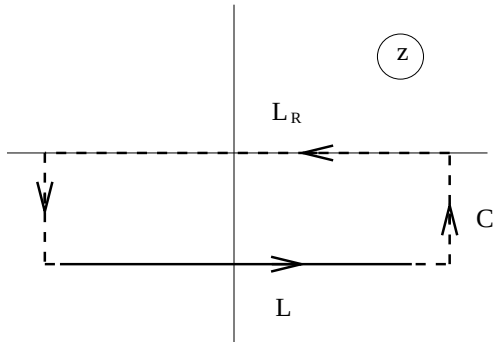
hiszen az integrandus ilyenkor az x változó páratlan függvénye (az integrandus $x \to -x$ transzformáció során előjelet vált). Nyilvánvaló, hogy bármilyen páratlan $f(-x) = -f(x)$ függvényre

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx[-f(-x)], \tag{C.48}$$

ahol áttérve az $y = -x$ integrálási változóra a Jacobi-determináns $J = \frac{\partial x}{\partial y} = -1$ és az integrál

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ f(x) \quad = \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx[-f(-x)] = \int_{-\infty}^{\infty} |J| dy[-f(y)] = -\int_{-\infty}^{\infty} dy\ f(y). \tag{C.49}$$

Itt viszont a jobb oldalon a baloldali integrál mínusz egyszerese áll, ezért az integrál zérus.



14. ábra. Az integrálás útja a z komplex síkon a C zárt görbe mentén.

3. Páros kitevőjű monom és Gauss-függvény szorzatának integrálja,

$$I_{2n}(a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x^{2n} e^{-ax^2} = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial a^n} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-ax^2} = (-1)^n \frac{\partial^n I(a)}{\partial a^n}, \quad n \geq 1 \tag{C.50}$$

Behelyettesítve az $I(a) = \sqrt{\pi/a}$ eredményt, és elvégezve az egymás utáni deriválásokat, kapjuk, hogy

$$I_{2n}(a) = \pi^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} \cdots \frac{2n-1}{2} a^{-\frac{2n+1}{2}} = \frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{2^n a^{-n-\frac{1}{2}}}. \tag{C.51}$$

4.

$$I(a,b) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-ax^2+bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}}, \quad a > 0, \tag{C.52}$$

és b tetszőleges valós paraméter. A bizonyításhoz alakítsuk a kitevőt teljes négyzetté,

$$-ax^2 + bx = -a\left(x - \frac{b}{2a}\right)^2 + \frac{b^2}{4a}, \tag{C.53}$$

majd térjünk át a $z = x - \frac{b}{2a}$,,eltolt" integrálási változóra,

$$I(a,b) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-ax^2+bx} = e^{\frac{b^2}{4a}} \int_{-\infty}^{\infty} dz\ e^{-az^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}}. \tag{C.54}$$

5. Ha az integrandus kitevőjében $a > 0$ és a lineáris tag együtthatója ib tiszta képzetes (b valós), akkor

$$I(a,b) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-ax^2+ibx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\frac{b^2}{4a}}, \tag{C.55}$$

ahol az eredmény nem más, mint a valós lineáris taggal kapott eredményből kapunk $b \to ib$ helyettesítéssel. Az integrandus kitevőjét most is teljes négyzetté egészíthetjük ki és áttérhetünk a $z = x - \frac{ib}{2a}$ integrálási változóra, ami azonban komplex. Ezért a z változóban az integrálás a valós tengellyel párhuzamos $\mathrm{Im}\ z = -i\frac{b}{2a}$ egyenletű $L^{\rightarrow}$ egyenes mentén történik a z komplex síkon $\mathrm{Re}\ z = -\infty$ felől $\mathrm{Re}\ z = +\infty$ irányban haladva (a jobbra mutató nyíl a felső indexben ezt az irányítást jelöli),

$$I(a,b) = e^{\frac{(ib)^2}{4a}} \int_{L^{\rightarrow}} dz\ e^{-az^2} = e^{-\frac{b^2}{4a}} \int_{L^{\rightarrow}} dz\ e^{-az^2}. \tag{C.56}$$

Az integrandus analitikus függvénye a z komplex változónak a valós tengely és az L egyenes közti tartományban, ezért

$$\oint_C dz\ e^{-az^2} = \int_{L^{\rightarrow}} dz\ e^{-az^2} + \int_{L_R^{\leftarrow}} dz\ e^{-az^2} = 0 \tag{C.57}$$

arra a zárt görbére, amely az $L^{\rightarrow}$ egyenesből, a valós $L_R^{\leftarrow}$ tengelyből és a $\mathrm{Re}\ z \to \pm\infty$ végtelenekben felvett, a képzetes tengellyel párhuzamos szakaszokból áll (ld. 14. ábra). (A nyilak a felső indexben a haladási irányt jelölik.) A képzetes tengellyel párhuzamos szakaszok járuléka az integrálhoz zérus, mert $\mathrm{Re}\ y \to \pm\infty$ esetén az integrandus minden hatványfüggvénynél gyorsabban tart zérushoz. Eért

$$\int_{L^{\rightarrow}} dz\ e^{-az^2} = -\int_{L_R^{\leftarrow}} dz\ e^{-az^2} = \int_{L_R^{\rightarrow}} dz\ e^{-az^2} = \sqrt{\pi}a, \tag{C.58}$$

és az integrál értéke

$$I(a,b) = \sqrt{\pi}ae^{-\frac{b^2}{4a}}. \tag{C.59}$$

D. Dirac-delta

A $\delta(x-a)$ Dirac-delta olyan ,,függvény", amelynek értéke mindenütt zérus, kivéve az $x=a$ pontot, ahol végtelen. Ez a furcsa tulajdonságú matematikai objektum és a deriváltjai úgy vannak értelmezve, mint

$$\int_{-\infty}^{\infty} dxK(x)f(x) \tag{D.1}$$

alakú integrálok $K(x)$ magjai, ahol $f(x)$ tetszőleges, ,,jó tulajdonságú" függvény. A Dirac-delta az a mag, amelyre

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\delta(x-a)f(x) = f(a) \tag{D.2}$$

teljesül tetszőleges, ,,jó tulajdonságú" $f(x)$ függvény esetén.

A Dirac-delta integrál alakjában is előállítható:

$$\delta(x-a) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega(x-a)}. \tag{D.3}$$

Valóban, tegyük be ezt a kifejezést a (D.1) alakú integrál magjának a helyébe:

$$\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{\infty} dx\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dke^{ik(x-a)}f(x)\\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dke^{-ika}\tilde{f}(k) = f(a).\end{aligned} \tag{D.4}$$

Itt az első egyenlőség az $\tilde{f}(k)$ Fourier-transzformált definíciójából következik, a második egyenlőség pedig az inverz Fourier-transzformció képletéből. Az (D.3) egyenlőség jobb oldalán álló integrál

tehát ugyanolyan hatású az (D.1) alakú integrálok magjában, mint a $\delta(x-a)$ Dirac-delta, ezért azonosítható vele.

A Dirac-delta néhány fontos tulajdonsága ugyancsak az (D.1) alakú integrálba való behelyettesítéssel igazolható:

$$\delta(-x) = \delta(x), \tag{D.5}$$

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|}\delta(x), \tag{D.6}$$

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{\left|\frac{df(x)}{dx}|_{x=x_i}\right|}, \tag{D.7}$$

$$x\delta(x) = 0, \tag{D.8}$$

$$f(x)\delta(x-x_0) = f(x_0)\delta(x-x_0), \tag{D.9}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\delta(a-x)\delta(x-b) = \delta(a-b), \tag{D.10}$$

$$\delta(x^2-a^2) = \frac{\delta(x-a)+\delta(x+a)}{2|a|}, \tag{D.11}$$

$$x\frac{d}{dx}\delta(x) = -\delta(x), \tag{D.12}$$

$$\tag{D.13}$$

ahol α, a és b tetszőleges, nem nulla valós számok, $f(x)$ tetszőleges, differenciálható függv
eny, amelynek zérushelyei az $x = x_i$ helyeken vannak, $f(x_i) = 0$.

A Dirac-deltának ismeretes néhány határérték-előállítása:

$$\begin{aligned}
\delta(x) &= \lim_{L\to\infty} \frac{\sin(xL)}{\pi x}, \\
\delta(x) &= \frac{1}{\pi}\lim_{T\to\infty} \frac{1-\cos(Tx)}{Tx^2}, \\
\delta(x) &= \lim_{\alpha\to 0}\frac{1}{\pi}\,\frac{\alpha}{\alpha^2+x^2}.
\end{aligned} \tag{D.14}$$

A Dirac-delta 3-dimenziós kiterjesztése:

$$\delta(\vec{r}-\vec{a}) = \delta(x-a_x)\delta(y-a_y)\delta(z-a_z) \tag{D.15}$$

ami a

$$\begin{aligned}
\int d^3r\delta(\vec{r}-\vec{a})f(\vec{r}) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz\delta(x-a_x)\delta(y-a_y)\delta(z-a_z)f(x,y,z) \\
&= f(a_x,a_y,a_z) = f(\vec{a})
\end{aligned} \tag{D.16}$$

integrállal van értelmezve. A 3-dimenziós Dirac-delta integrálelőállítása:

$$\delta(\vec{r}-\vec{a}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3k e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{a})}. \tag{D.17}$$

Gömbi polárkoordinátákban kifejezve:

$$\delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{a}) = \frac{1}{r^2}\delta^{(2)}(\vec{n}-\vec{n}_a)\delta(r-a), \quad \text{ha } a \neq 0 \tag{D.18}$$

ill.[117]

$$\delta^{(3)}(\vec{r}) = \frac{2}{r^2}\delta^{(2)}(\vec{n})\delta(r), \quad \text{ha } a = 0 \tag{D.19}$$

ahol $\vec{r} = r\vec{n}$, $\vec{a} = a\vec{n}_a$, $|\vec{r}| = r$, $|\vec{a}| = a$. Itt az egységvektorokra vonatkozó 2-dimenziós Dirac-delta

$$\delta^{(2)}(\vec{n}-\vec{n}_a) = \frac{\delta(\theta-\theta_a)\delta(\varphi-\varphi_a)}{\sin\theta} \tag{D.20}$$

alakba is írható.
Egyrészt írhatjuk, hogy tetszőleges $f(\theta, varphi)$,,jó viselkedésű" függvény esetén

$$f(\theta_a,\varphi_a) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, \delta^{(2)}(\vec{n}-\vec{n}_a) f(\theta,\varphi) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, \frac{\delta(\theta-\theta_a)\ \delta(\varphi-\varphi_a)}{\sin\theta} f(\theta,\varphi), \tag{D.21}$$

másrészt pedig tetszőleges $f(\vec{r})$ függvény esetén

$$\begin{aligned}\int d^3\vec{r}\delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{a})f(\vec{r}) &= \int_0^{\infty} r^2 dr\ \frac{b}{r^2}\delta(r-a)\delta(\vec{n}-\vec{n}_a)f(r,\theta,\varphi) \\ &= b\int_0^{\infty} dr\delta(r-a)\delta(\vec{n}-\vec{n}_a)f(r,\theta,\varphi) = f(a,\theta_a,\varphi_a),\end{aligned} \tag{D.22}$$

ahol $a = 0$ esetén $b = 2$ és automatikusan megszűnik $f(\vec{a})$ szögfüggése, ill. $a \neq 0$ esetén $b = 1$.

Hivatkozások

[1] L.D. Landau, E.M. Lifsic, *Elméleti fizika III.*, *Kvantummechanika* (Tankönyvkiadó, Budapest, 1976)

[2] Marx Gy., *Kvantummechanika* (Műszaki, Budapest, 1971)

[3] D.I. Blohincev, *Osznovü kvantovoj mechanyiki,* (Nauka, Moszkva, 1983; hatodik, javított kiadás)

[117] Az $a \to 0$ határátmenet nem képezhető közvetlenül, csak a teljes térre vett $\int d^3\vec{r}\delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{a})\ f(\vec{r})$ integrál határértékét lehet képezni, miután elvégeztük a kijelölt integrálást. Ebből adódik az $a \neq 0$ és az $a = 0$ eset közötti 2-es faktor különbség a képletekben, ugyanis $\int_0^{\infty} dr\ \delta(r)f(r) = \frac{1}{2}f(0)$, míg $\int_0^{\infty} dr\ \delta(r-a)f(r) = f(a)$, ha $a \neq 0$.