

**BEVEZETÉS A
KVANTUMMECHANIKÁBA**
Piszkozat

Sailer Kornél

Egyetemi előadás

Elméleti Fizikai Tanszék
Debreceni Egyetem
Debrecen
2002-2008.

Contents

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | A KVANTUMMECHANIKA ELVI ALAPJAI | 7 |
| 1.1 | Részecske-hullám dualitás | 7 |
| 1.2 | Az alapelvek | 9 |
| 1.2.1 | A lineáris szuperpozíció elve | 9 |
| 1.2.2 | A fizikai mérések valószínűségi kimenetele | 11 |
| 1.2.3 | A határozatlansági elv | 17 |
| 1.2.4 | Kanonikus kvantálás. A megfeleltetési elv | 21 |
| 2 | MOZGÁSEGYENLETEK A KVANTUMMECHANIKÁBAN | 26 |
| 2.1 | Az állapotvektor időfüggése | 26 |
| 2.1.1 | A Hamilton-operátor és a Schrödinger-egyenlet | 26 |
| 2.1.2 | Az evolúciós operátor és a Hamilton-operátor | 27 |
| 2.1.3 | A Hamilton-operátor fizikai jelentése | 29 |
| 2.1.4 | A Hamilton-operátor, mint fizikai modell | 31 |
| 2.2 | Fizikai mennyiségek időfüggése | 31 |
| 2.3 | Stacionárius állapotok | 32 |
| 2.3.1 | A stacionárius állapot fogalma és időfüggése | 32 |
| 2.3.2 | Fizikai mennyiségek várható értéke stacionárius állapotban | 33 |
| 3 | FIZIKAI MENNYISÉGEK | 35 |
| 3.1 | Az állapotok és az operátorok ábrázolása | 35 |
| 3.1.1 | Ismétlés: fizikai mennyiségek | 43 |
| 3.1.2 | Az állapottér vektorainak lineáris ábrázolása | 43 |
| 3.2 | Összetett rendszer | 43 |
| 3.2.1 | Független részekből álló rendszer | 43 |
| 3.2.2 | Kölcsönható részekből álló rendszer | 52 |
| 3.3 | A hullámfüggvény koordináta-reprezentációban | 52 |
| 3.3.1 | Pontrészecske | 52 |
| 3.3.2 | N -részecskés rendszer | 52 |
| 3.3.3 | A helykoordináta és az impulzus | 52 |
| 3.3.4 | A pályaimpulzusmomentum | 56 |
| 3.3.5 | A spin | 66 |
| 4 | EGYSZERŰ FIZIKAI RENDSZEREK | 71 |
| 4.1 | Spin külső mágneses térben | 72 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 4.1.1 | Szabad spin | 72 |
| 4.1.2 | Spin homogén külső mágneses térben | 73 |
| 4.1.3 | Spin T ideig ható, homogén mágneses térben | 74 |
| 4.2 | Pontrészecske mozgása | 77 |
| 4.2.1 | Belső szabadsági fokok nélküli részecske Hamilton-operátora | 77 |
| 4.2.2 | Nem zérus spinű részecske Hamilton-operátora | 78 |
| 4.2.3 | A koordináta-hullámfüggvény valószínűségi jelentése | 80 |
| 4.2.4 | Szabad részecske mozgása inerciarendszerben | 82 |
| 4.2.5 | Ehrenfest tétele. Newton törvényei? | 85 |
| 4.2.6 | Dobozba zárt részecske | 87 |
| 4.2.7 | Lineáris harmonikus oszcillátor | 92 |
| 4.2.8 | Részecske mozgása centrális potenciálban. Kepler törvényei? | 96 |
| 4.2.9 | Hidrogénatom | 100 |
| 4.2.10 | Részecske szóródása centrális potenciálon. Szórási amplitúdó és hatáskeresztmetszet | 109 |
| 4.2.11 | Alagúteffektus | 111 |
| 5 | RÉSZECSEKERENDSZEREK | 115 |
| 5.0.12 | Részecskeazonosság. Fermionok és bozonok | 115 |
| 5.0.13 | Atomok Mengyelejev-féle periodusos rendszere | 118 |
| 5.0.14 | Ideális gázok alacsony hőmérsékleten | 120 |
| 5.0.15 | Összefonódott állapotok | 120 |
| 5.0.16 | Bose-kondenzátumok interferenciája | 120 |
| 6 | KITEKINTÉS | 121 |
| 6.1 | A Feynman-féle pályaintegrálos kvantálás | 121 |
| 6.2 | Részecskefizika és kvantumtérelmélet. Az alapvető kölcsönhatások | 121 |
| A | A kvantummechanika kísérleti alapjai | 122 |
| A.1 | A kvantummechanika kísérleti előzményei | 122 |
| A.1.1 | A foton, mint az elektromágneses mező részecskéje | 122 |
| A.1.2 | Anyaghullámok | 130 |
| A.1.3 | Az atomok diszkrét gerjesztési energiái | 133 |
| A.1.4 | Az elektron spinjének felfedezése | 135 |
| A.2 | A kvantummechanika néhány további kísérleti bizonyítéka | 137 |
| B | Várható érték, szórásnégyzet | 138 |

| | |
|-------------------------|------------|
| C Gauss-integrál | 142 |
| D Dirac-delta | 145 |

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 határeseté.

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 mutatják 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. Nevezetesen 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 elektrorra, 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 impulzuszómaradás 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

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

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, $e = -|e|$. Millikan¹ 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 kör alakú 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 részecskére 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

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (1.1.2)$$

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.

¹Robert 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 elektrorra (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 pontrészcseke 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 nyalábjába, 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 pontrészcsekékre érvényes Einstein-féle $E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$ összefüggés alapján **a foton nyugalmi tömege zérusnak adódik**:

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

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.

Érdeemes 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 értéként 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 csererelációknak 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 $a_1 f_1 + a_2 f_2$ lineáris kombinációjuk is klasszikus hullám. Tanultuk, hogy minden periodikus hullám felbontható harmonikus hullámok lineáris szuperpozíciójára, ez a Fourier³-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 alapelveként 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 dualításra. 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-ke”-nek olvassuk. Az állapotok lineáris vektorterét \mathcal{H} -val

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

³Jean 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 Hilbert⁴-terének nevezzük⁵.

1.2.2 A fizikai mérések valószínűségi kimenetele

A fizikai mérés, mint véletlen kísérlet

A fizikai rendszer állapotáról mérések segítségével szerezhetünk ismereteket. 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:

⁴David 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, amelyben 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.

⁵Ez 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 algebrait, 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 kifejlesztett munkásságával a számítástudomány alapjait rakta le.

Az 1932. évi fizikai Nobel-díjat visszatartották, majd 1933-ban Werner Heisenbergnek (1901-1976, német) ítelték oda 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-algebraját. 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: $\mathcal{H} = \sum_i \mathcal{H}_i$.
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 pontrészcseke helyzetét határozzuk meg úgy, hogy pillanatfelvételt készítünk róla, akkor fényt szórunk 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 engedelmessé váló 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:

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

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

$$\hat{f}|\phi_i\rangle = f_i|\phi_i\rangle. \quad (1.2.2)$$

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

$$\langle\psi|c_1\phi_1 + c_2\phi_2\rangle = c_1\langle\psi|\phi_1\rangle + c_2\langle\psi|\phi_2\rangle \quad (1.2.3)$$

teljesüljön,

- (c) és teljesüljön az alábbi tulajdonság:

$$\langle\psi|\phi\rangle = [\langle\phi|\psi\rangle]^*, \quad (1.2.4)$$

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

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0, \quad (1.2.5)$$

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,

$$\langle c_1\psi_1 + c_2\psi_2 | \phi \rangle = c_1^* \langle \psi_1 | \phi \rangle + c_2^* \langle \psi_2 | \phi \rangle. \quad (1.2.6)$$

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 abszolút értékének négyzetét:

$$w_i = |\langle \phi_i | \psi \rangle|^2. \quad (1.2.7)$$

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**. Másképpen 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 nevezük, ha az egyikből vett bármely vektor ortogonális a másikkól 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 nevezünk, 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 nevezük, ha bármely $|\phi\rangle$ és $|\psi\rangle$ állapotvektorok esetén,**

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

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

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

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 összegük⁶ a teljes Hilbert-teret kifeszíti, $\mathcal{H} = \sum_i \oplus \mathcal{H}_i$.** Ezért

⁶A \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} állapotterben.

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

$$\langle\phi_j|\phi_i\rangle = \delta_{i,j} \quad (1.2.10)$$

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

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle = \sum_i |\phi_i\rangle \langle\phi_i|\psi\rangle. \quad (1.2.11)$$

Itt felhasználtuk, hogy a sajátvektorok ortonormáltsága következtében a lineárkombinációk együtthathatók

$$c_i = \langle\phi_i|\psi\rangle. \quad (1.2.12)$$

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

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

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

$$\hat{P}_i |\psi\rangle = |\phi_i\rangle \langle\phi_i|\psi\rangle, \quad (1.2.14)$$

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

$$\hat{P}_i^2 = \hat{P}_i \quad (1.2.15)$$

azonosság 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

$$w_i = |c_i|^2 = |\langle\phi_i|\psi\rangle|^2 \geq 0 \quad (1.2.16)$$

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

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

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,

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle, \quad (1.2.18)$$

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

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{mérés}} |\phi_i\rangle, \quad (1.2.19)$$

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

$$\langle \phi_{i_0} | \psi \rangle = \langle \phi_{i_0} | \phi_{i_0} \rangle = 1, \quad \langle \phi_{j \neq i_0} | \psi \rangle = \langle \phi_{j \neq i_0} | \phi_{i_0} \rangle = 0. \quad (1.2.20)$$

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:

$$\bar{f} = \langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle \quad (1.2.21)$$

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

$$\bar{f} = \langle \phi_i | \hat{f} | \phi_i \rangle = f_i \langle \phi_i | \phi_i \rangle = f_i. \quad (1.2.22)$$

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

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

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

$$(\psi, \phi) = \langle \psi | \phi \rangle \quad (1.2.24)$$

alakban jelöltük⁷, a $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ és $\hat{f}|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ vektorokét pedig

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

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:

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

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 $|\dots\rangle$ -, ill. a $\langle \dots |$ 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:

$$\hat{P}_i = |\phi_i\rangle\langle\phi_i|, \quad (1.2.28)$$

az egységoperátor

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

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

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

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 pontrészeske 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 jelenséget tud

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

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

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.

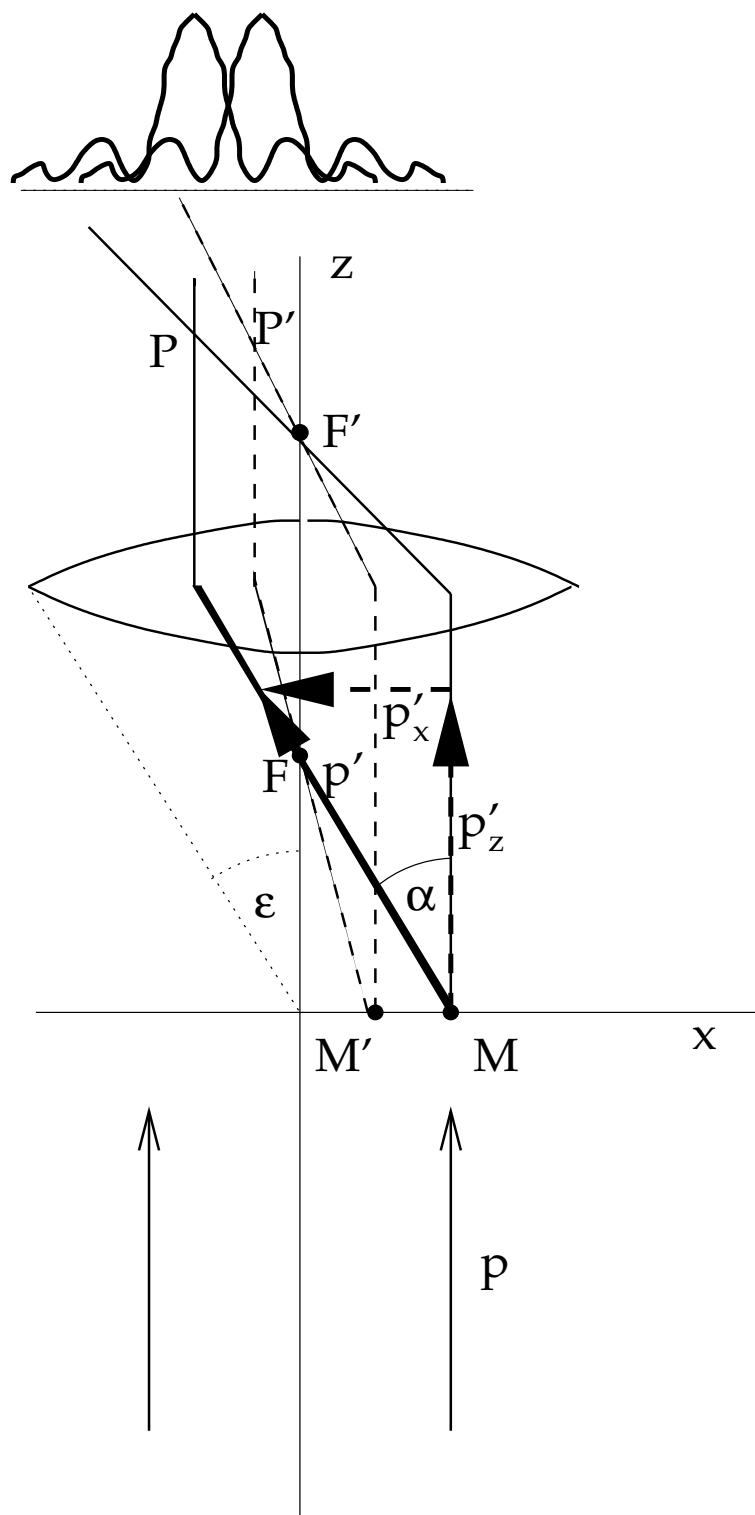


Figure 1: A Heisenberg-féle mikroszkópos gondolatkísérlet vázlata.

létrehozni. Alább, a Heisenberg által javasolt mikroszkópos gondolat kísérletet 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 gondolat kísérletben 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 másik 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 analóg sugármenetek annak felelnek meg, mintha az elektron, mint klasszikus pontrészesecske 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 pontrészesecske lenne. Ha azonban az elektronok ugyanúgy elhajlási jelenséget mutatnak, mint a klasszikus elektromágneses hullám, akkor az M tárgy pont 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' tárgy pont képe ugyancsak a képsíkban létrejövő, a P' képpontra centrált hasonló elhajlási kép. Az elektronmikroszkóp segítségével az M és M' tárgy pontokat 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 tárgy pont közti legkisebb $\overline{MM'} = \delta x$ távolságra

$$\delta x = \frac{\lambda}{2 \sin \epsilon}, \quad (1.2.31)$$

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

$$\delta x = \frac{\lambda}{2 \sin \epsilon} = \frac{h}{2p \sin \epsilon} \quad (1.2.32)$$

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:

$$\delta P_x = 2p \sin \epsilon. \quad (1.2.33)$$

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

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

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

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

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 nagyobbak 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 nagyobbak 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

$$\Delta p_i \Delta x_i > \mathcal{O}(\hbar), \quad (1.2.36)$$

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 \mathcal{H} állapotterén skalárszorzatot vezetünk 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

$$[\hat{f}, \hat{g}] \equiv \hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} = 0 \quad (1.2.37)$$

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 rendelkezik.

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:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] \neq 0 \quad (1.2.38)$$

Ennek az összefüggésnek az az általánosítása, hogy bármely f fizikai mennyiség és a hozzá (klasszikus mechanikai értelemben) kanonikusan konjugált π_f mennyiség operátorainak kommutátora nem zérus:

$$[\hat{f}, \hat{\pi}_f] \neq 0. \quad (1.2.39)$$

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 definícióját:**

$$\Delta f = \left[\langle \psi | \left(\hat{f} - \langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle \right)^2 | \psi \rangle \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (1.2.40)$$

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

$$\Delta x \Delta p_x \gtrsim \hbar \quad (1.2.41)$$

egyenlőtlenség teljesüljön. Általánosságban tetszőleges f mennyiség és a hozzá kanonikusan konjugált π_f mennyiség bizonytalanságainak szorzatára a

$$\Delta f \Delta \pi_f \gtrsim \hbar \quad (1.2.42)$$

alakú egyenlőtlenségnek kell teljesülnie. Ez az ún. **Heisenberg-féle határozatlansági reláció** általános alakja.

Heisenberg-től 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**

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}_x] &= i\hbar, & [\hat{y}, \hat{p}_y] &= i\hbar, & [\hat{z}, \hat{p}_z] &= i\hbar, \\ [\hat{x}, \hat{y}] &= [\hat{x}, \hat{z}] = [\hat{y}, \hat{z}] &= 0, \\ [\hat{p}_x, \hat{p}_y] &= [\hat{p}_x, \hat{p}_z] = [\hat{p}_y, \hat{p}_z] &= 0 \end{aligned} \quad (1.2.43)$$

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

$$\left(\xi \hat{x} + \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x \right) |\psi\rangle \quad (1.2.44)$$

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

$$\begin{aligned} 0 \leq I(\xi) &\equiv \left\| \left(\xi \hat{x} + \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x \right) |\psi\rangle \right\|^2 = \langle \psi | \left(\xi \hat{x} - \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x \right) \left(\xi \hat{x} + \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x \right) |\psi\rangle \\ &= \xi^2 \langle \psi | \hat{x}^2 | \psi\rangle + \xi \frac{i}{\hbar} \langle \psi | [\hat{x}, \hat{p}_x] | \psi\rangle + \frac{1}{\hbar^2} \langle \psi | \hat{p}_x^2 | \psi\rangle. \end{aligned} \quad (1.2.45)$$

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

$$\langle \psi | \hat{x}^2 | \psi\rangle = (\Delta x)^2, \quad \langle \psi | \hat{p}_x^2 | \psi\rangle = (\Delta p_x)^2. \quad (1.2.46)$$

Az egyenlőtlenség tehát

$$0 \leq \xi^2 (\Delta x)^2 - \xi + \frac{1}{\hbar^2} (\Delta p_x)^2 \quad (1.2.47)$$

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

$$1 - 4(\Delta x)^2 \frac{1}{\hbar^2} (\Delta p_x)^2 \leq 0 \quad (1.2.48)$$

egyenlőtlenség teljesüljön, ahonnan

$$(\Delta x)(\Delta p_x) \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (1.2.49)$$

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 pontrészcsekből 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 $a, b, \dots = 1, 2, \dots, N$ részecske-index, hogy az N -részecskés rendszer hányadik részecskéjéről van szó, továbbá az $j, k, \dots = 1, 2, 3$ index a vektoroperátorok megfelelő Descartes-komponenseit, akkor az \vec{r}_a helyzetvektor- és a \vec{p}_a impulzus-operátorokra vonatkozó kanonikus csererelációk az alábbiak:

$$[\hat{x}_{a,j}, \hat{p}_{b,k}] = i\hbar\delta_{a,b}\delta_{j,k}. \quad (1.2.50)$$

A klasszikus mechanika $f(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$ fizikai mennyiségeinek megfelelő kvantummechanikai \hat{f} operátort az $\hat{f} = f(\hat{\vec{r}}_1, \dots, \hat{\vec{r}}_N, \hat{\vec{p}}_1, \dots, \hat{\vec{p}}_N)$ megfeleltetés adja⁸.

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 Poisson⁹-zárójelek,

$$\{x, p_x\}_P = \{y, p_y\}_P = \{z, p_z\}_P = 1,$$

⁸Az f fizikai mennyiség változóinak analitikus függvénye a klasszikus mechanikában. A megfelelő \hat{f} operátor egyértelműsítése a klasszikus Taylor-sor koordináta- és impulzuskomponenseket 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.

⁹Siméon 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.

$$\{x, y\}_P = \{x, z\}_P = \{y, z\}_P = 0, \quad \{p_x, p_y\}_P = \{p_x, p_z\}_P = \{p_y, p_z\}_P = 0 \quad (1.2.51)$$

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

| Klasszikus rendszer | → | Kvantummechanikai rendszer |
|---------------------|---|-----------------------------------|
| x | → | \hat{x} |
| p_x | → | \hat{p}_x |
| $\{.,.\}_P$ | → | $\frac{1}{i\hbar}[\cdot, \cdot]$ |
| $f(x, p_x)$ | → | $\hat{f} = f(\hat{x}, \hat{p}_x)$ |

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 KVANTUMMECHANIKÁBAN

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 evolúciós operátorral lehet leírni. Az evolúciós operátor is és az időtől függő állapotvektor is eleget tesz egy-egy mozgásegyenletnek, amelyek az úgynevezett Schrödinger¹⁰-egyenletnek különböző alakjai. Megismerkedünk a Hamilton-operátorral¹¹, amely meghatározza az evolúciós 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:

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

ha $\delta t \rightarrow 0$. 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 legyen. Ezért a $\hat{H}(t)$ operátornak lineáris operátornak kell lennie. A (2.1.1) egyenletnek megfelelően az

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

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

¹¹Az 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.

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 evolúciós 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, evolúcióját:

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

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

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

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

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

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

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

¹²Az 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

$$\left(i\hbar \partial_t \langle \psi(t) | \right) |\psi(t)\rangle + \langle \psi(t) | \left(i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle \right) = 0, \quad (2.1.3)$$

ill. hogy

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

azaz

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

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

differenciálegyenletet¹³, amelyet – értelemszerűen – az

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

kezdőfeltétellel kell megoldani, hogy megkapjuk az evolúciós operátort.

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

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

Látjuk, hogy a **Hamilton-operátor egyértelműen meghatározza az evolúciós operátort**. A Hamilton-operátor akkor is egyértelműen meghatározza az evolúciós operátort, ha függ az időtől¹⁴. Mivel a Hamilton-operátor lineáris operátor, azért az (2.1.10) operátor-egyenlet integrálásával kapott **evolúciós 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 evolúciós 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

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

$$\hat{1} + \mathcal{O}((\delta t)^2) = [\hat{U}(t + \delta t, t_0)]^{-1} \hat{U}(t + \delta t, t_0) = [\hat{U}(t + \delta t, t_0)]^\dagger \hat{U}(t + \delta t, t_0)$$

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

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

¹⁴Ha a Hamilton-operátor függ az időtől, akkor

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

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.

¹⁵Az \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

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

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

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

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 eltol” 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:

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

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 meggyőződünk 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-operátora¹⁶, amelynek várható értéke a rendszer energiája és amely pontosan megmondja, hogy mi az a fizikai rendszer, amelyet vizsgálunk.

¹⁶Valójában 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 részecskéknél a helykoordinátáikon és impulzuskomponenseiken kívül más szabadsági fokok 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:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{f}(t) | \psi(t) \rangle \\ &= \left(\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right) \hat{f}(t) | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{f}(t) \left(\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right) + \langle \psi(t) | \left(\frac{d}{dt} \hat{f}(t) \right) | \psi(t) \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | [\hat{H}(t) \hat{f}(t) - \hat{f}(t) \hat{H}(t)] | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \left(\frac{d}{dt} \hat{f}(t) \right) | \psi(t) \rangle. \end{aligned} \quad (2.2.21)$$

Az f fizikai mennyiséget megmaradó fizikai mennyiségnek nevezzük, ha várható értéke állandó, azaz nem függ az időtől. A (2.2.21) 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

$$[\hat{f}, \hat{H}] = 0. \quad (2.2.22)$$

2. **Értelmezhetünk egy olyan \hat{f} operátort, amelynek várható értéke az \hat{f} operátor várható értékének az idő szerinti első deriváltja tetszőleges állapotban:**

$$\dot{\hat{f}} \equiv \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{f}] + \frac{d}{dt}\hat{f}(t). \quad (2.2.23)$$

Például, ha $\hat{f} = \hat{x}$ az x helykoordináta operátora, akkor

$$\dot{\hat{x}} \equiv \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{x}] + \frac{d}{dt}\hat{x}(t) \quad (2.2.24)$$

operátort tekinthetjük a v_x sebességkomponens operátorának. Ez természetesen 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 (2.2.23) 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 \hat{f} operátor azonosan zérus, azaz ha teljesül, hogy

$$\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{f}] + \frac{d}{dt}\hat{f}(t) = 0. \quad (2.2.25)$$

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

Tekintsük a Schrödinger-egyenletet,

$$i\hbar\partial_t|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle, \quad (2.3.26)$$

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

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = E|\psi(t)\rangle. \quad (2.3.27)$$

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 $n = 0, 1, 2, \dots$ egész számokkal. (Feltesszük, hogy a rendszer véges térfogatban mozog, ekkor az energiasajátértékek mindig diszkréték, továbbá, hogy a sajátértékek nem elfajultak.) Ekkor

$$\hat{H}|\psi_n(t)\rangle = E_n|\psi_n(t)\rangle \quad (2.3.28)$$

és a stacionárius állapotokra felírt Schrödinger-egyenlet

$$i\hbar\partial_t|\psi_n(t)\rangle = E_n|\psi_n(t)\rangle \quad (2.3.29)$$

alakot ölt, amelynek a megoldása

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}|\psi_n(t_0)\rangle, \quad (2.3.30)$$

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,

$$E_n = \langle\psi_n(t)|\hat{H}|\psi_n(t)\rangle = \langle\psi_n(t_0)|\hat{H}|\psi_n(t_0)\rangle \quad (2.3.31)$$

a Hamilton-operátornak éppen az a sajátértéke, amelyhez a stacionárius állapot mint sajátvektor tartozik¹⁷.

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 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

¹⁷Előfordulhat, 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 annyiszorosán, 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.

stacionárius állapotban időben állandó:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\psi_n(t)|\hat{f}|\psi_n(t)\rangle &= -\frac{i}{\hbar}\langle\psi_n(t)|[\hat{H}\hat{f} - \hat{f}\hat{H}]\psi_n(t)\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar}E_n[\langle\psi_n(t)|\hat{f}|\psi_n(t)\rangle - \langle\psi_n(t)|\hat{f}|\psi_n(t)\rangle] = 0.\end{aligned}\quad (2.3.32)$$

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 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. Megkérjük 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

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

$$\hat{f}|\phi_n\rangle = f_n|\phi_n\rangle \quad (3.1.1)$$

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:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle, \quad (3.1.2)$$

ahol

$$c_n = \langle \phi_n | \psi \rangle, \quad (3.1.3)$$

és a sajátvektorok kielégítik a

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{n,m} \quad (3.1.4)$$

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

$$\sum_n |c_n|^2 = 1 \quad (3.1.5)$$

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 át¹⁸. Ha a tetszőleges $|\psi\rangle$ állapotú rendszeren elvégezzük az f fizikai mennyiség mérését, akkor valamelyik f_n sajátértéket kapjuk eredményül. Ha nagyon sokszor megismételjük ezt a mérést, mindig ugyanazon a $|\psi\rangle$ rendszeren, akkor bizonyos gyakoriságokkal fogjuk az egyes lehetséges f_n értékeket mérni az egyes egyedi kísérletekben. A kísérletek számával végtelenhez tartva, az egyes gyakoriságok meghatározott határértékekhez, a $w_n = |c_n|^2$ valószínűségekhez tartanak. Az állapot normáltsága biztosítja, hogy az egyes valószínűségek összege 1. Azt mondjuk ilyenkor, hogy az f mennyiségnek a $|\psi\rangle$ állapotban az értéke a

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

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 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 egyértelműségeen 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.

¹⁸Az 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.

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 $|F\rangle$ sajátfüggvényeinek ortonormált teljes rendszerét:

$$\hat{F}|F\rangle = F|F\rangle, \quad \langle F'|F\rangle = \delta_{F,F'} \quad (3.1.7)$$

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

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

$$|\psi\rangle = \sum_F c_F |F\rangle, \quad c_F = \langle F|\psi\rangle, \quad (3.1.8)$$

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

$$c_F = \langle F|\psi\rangle \equiv \psi(F) \quad (3.1.9)$$

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.

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

$$\begin{aligned} 1 = \langle \psi|\psi\rangle &= \sum_{F',F} c_{F'}^* c_F \langle F'|\hat{1}|F\rangle = \sum_{F',F} c_{F'}^* c_F \langle F'|F\rangle = \sum_{F',F} c_{F'}^* c_F \delta_{F',F} \\ &= \sum_F |c_F|^2 = \sum_F |\psi(F)|^2. \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

Ez folytonos F értékek esetén azt jelenti, hogy

$$\int dF |\psi(F)|^2 = 1, \quad (3.1.11)$$

azaz hogy a hullámfüggvény négyzetesen integrálható.

4. Két tetszőleges

$$|\psi\rangle = \sum_F c_F |F\rangle, \quad |\phi\rangle = \sum_F b_F |F\rangle \quad (3.1.12)$$

állapotvektor skaláris szorzata

$$\langle\psi|\phi\rangle = \sum_{F',F} c_{F'}^* b_F \langle F'|F\rangle = \sum_F c_F^* b_F \quad (3.1.13)$$

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

$$\langle\psi|\phi\rangle = \sum_F \psi^*(F) \phi(F) \quad (3.1.14)$$

diszkrét spektrumú F mennyiség esetén, ill.

$$\langle\psi|\phi\rangle = \int dF \psi^*(F) \phi(F) \quad (3.1.15)$$

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 definíciója:

$$O_{F,F'} = \langle F|\hat{O}|F'\rangle. \quad (3.1.16)$$

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:

$$\Psi(F) = \langle F|\hat{O}|\psi\rangle = \sum_{F'} \langle F|\hat{O}|F'\rangle \langle F'|\psi\rangle = \sum_{F'} O_{F,F'} \psi(F'). \quad (3.1.17)$$

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

$$\Psi(F) = \int dF' O_{F,F'} \psi(F'). \quad (3.1.18)$$

(b) Tetszőleges f fizikai mennyiség várható értéke

$$\bar{f} = \langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle = \sum_{F',F} c_{F'}^* c_F \langle F'|\hat{f}|F\rangle = \sum_{F',F} \psi^*(F') \psi(F) f_{F',F} \quad (3.1.19)$$

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

$$f_{F',F} = \langle F'|\hat{f}|F\rangle \quad (3.1.20)$$

mátrix segítségével.

6. Könnyű ellenőrizni, hogy önadjungált ill. unitér operátornak a (3.1.13) skalárszorzatra nézve rendre önadjungált, ill. unitér mátrix felel meg.

Legyen \hat{f} önadjungált operátor, ekkor

$$(f_{F',F})^{t*} = (f_{F,F'})^* = [\langle F|\hat{f}|F'\rangle]^* = [\langle F'|\hat{f}^\dagger|F\rangle]^* = \langle F'|\hat{f}^\dagger|F\rangle = \langle F'|\hat{f}|F\rangle = f_{F',F} \quad (3.1.21)$$

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

Legyen \hat{U} unitér operátor, ekkor

$$(U_{F,F'})^* = (U^{t*})_{F',F} = \langle F'|\hat{U}^\dagger|F\rangle = \langle F'|\hat{U}^{-1}|F\rangle = (U^{-1})_{F',F}, \quad (3.1.22)$$

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:

$$\psi(G) = \langle G|\psi\rangle = \sum_F \langle G|F\rangle \langle F|\psi\rangle = \sum_F \langle G|F\rangle \psi(F). \quad (3.1.23)$$

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:

$$O_{G,G'} = \langle G|\hat{O}|G'\rangle = \sum_{F,F'} \langle G|F\rangle \langle F|\hat{O}|F'\rangle \langle F'|G'\rangle = \sum_{F,F'} U_{G,F} O_{F,F'} (U^\dagger)_{F',G'}. \quad (3.1.24)$$

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

| | | | | |
|----------------------|----------------------------------|-------------------|--|--------------------|
| 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 számegeyes 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:

$$\langle F'|\hat{F}|F\rangle = F\langle F'|F\rangle = F\delta_{F',F} \quad (3.1.25)$$

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

A fenti, lineáris ábrázolás fontos következményei,

1. **hogyan operátorok lineáris kombinációjának a megfelelő mátrixok ugyanolyan együtthatókkal képezett lineáris kombinációja felel meg,**
2. **hogyan operátorok egymás utáni végrehajtásának a megfelelő mátrixok egymás utáni ugyanolyan sorrendű alkalmazása felel meg, ill. hogyan**
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:

$$\hat{O} = 0 \implies \langle F|\hat{O}|F'\rangle = O_{F,F'} = 0. \quad (3.1.26)$$

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:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle F|\hat{O}_2\hat{O}_1|F'\rangle = \langle F|\hat{O}_2\hat{1}\hat{O}_1|F'\rangle = \sum_{F''} \langle F|\hat{O}_2|F''\rangle \langle F''|\hat{O}_1|F'\rangle \\ &= \sum_{F''} (O_2)_{F,F''} (O_1)_{F'',F'}. \end{aligned} \quad (3.1.27)$$

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:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle F|\hat{O}|\psi\rangle = \langle F|\hat{O}\hat{1}|\psi\rangle = \sum_{F'} \langle F|\hat{O}|F'\rangle \langle F'|\psi\rangle \\ &= \sum_{F'} O_{F,F'} \psi(F'), \end{aligned} \quad (3.1.28)$$

azaz

$$\hat{O}|\psi\rangle = 0 \implies \sum_{F'} O_{F,F'}\psi(F') = 0. \quad (3.1.29)$$

Koordináta-reprezentáció. 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

$$|\psi\rangle \leftrightarrow \psi(x, y, z) = \langle x, y, z | \psi \rangle \quad (3.1.30)$$

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

$$\hat{x}|x, y, z\rangle = x|x, y, z\rangle, \quad \hat{y}|x, y, z\rangle = y|x, y, z\rangle, \quad \hat{z}|x, y, z\rangle = z|x, y, z\rangle, \quad (3.1.31)$$

amit tömören így jelölhetünk:

$$\hat{\vec{r}}|\vec{r}\rangle = \vec{r}|\vec{r}\rangle. \quad (3.1.32)$$

Ekkor az állapotvektorok skalárszorzata,

$$\begin{aligned} \langle \psi | \phi \rangle &= \int dx \int dy \int dz \langle \psi | x, y, z \rangle \langle x, y, z | \phi \rangle = \int dx \int dy \int dz \psi^*(x, y, z) \phi(x, y, z) \\ &= \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \phi(\vec{r}), \end{aligned} \quad (3.1.33)$$

véges és ennek következménye, a négyzetesen integrálhatóság azt jelenti, hogy az

$$\int dx \int dy \int dz |\psi(x, y, z)|^2 = \int d\vec{r} |\psi(\vec{r})|^2 \quad (3.1.34)$$

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

$$\int dx \int dy \int dz |\psi(x, y, z)|^2 = \int d\vec{r} |\psi(\vec{r})|^2 = 1. \quad (3.1.35)$$

Az a tény, hogy a hullámfüggvények 1-re vannak normálva, ill. hogy a normálási integrál integrandusa nem negatív valós szám egyúttal azt is megengedi, hogy a

$$dw(\vec{r}) \equiv |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz = |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} \quad (3.1.36)$$

infinitezimális mennyiséget úgy értelmezzük, mint annak a $dw(\vec{r})$ valószínűségét, hogy a részecske az $\vec{r} = (x, y, z)$ pont környezetében felvett $dV = dx dy dz = d\vec{r}$ infinitezimális térfogatelemben található. A normálási integrál azt jelenti ekkor, hogy a részecske a térben valahol bizonyosan 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 koordinátareprezentációban. Ha megtaláltuk az \hat{f} operátornak a koordinátareprezentációban megfelelő $f_{x,y,z;x',y',z'}$ mátrixot, akkor segítségével írhatjuk, hogy

$$\langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle = \int dx dy dz dx' dy' dz' \psi^*(x, y, z) f_{x,y,z;x',y',z'} \psi(x', y', z'). \quad (3.1.37)$$

Ha az f fizikai mennyiség mátrixa koordinátareprezentációban diagonális, azaz

$$f_{x,y,z;x',y',z'} = \hat{f}_{x,y,z} [\delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')] \equiv \hat{f}_{\vec{r}} \delta(\vec{r}-\vec{r}') \quad (3.1.38)$$

alakú, ahol $\hat{f}_{x,y,z} = \hat{f}_{\vec{r}}$ az x , y és z koordináták függvényére ható differenciáloperátor, akkor a várható érték az alábbi alakban írható:

$$\langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle = \int dx dy dz \psi^*(x, y, z) \hat{f}_{x,y,z} \psi(x, y, z) = \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \hat{f}_{\vec{r}} \psi(\vec{r}). \quad (3.1.39)$$

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 a

$$\langle x', y', z' | \hat{x} | x, y, z \rangle = x \langle x', y', z' | x, y, z \rangle = x \delta(x'-x) \delta(y'-y) \delta(z'-z) \quad (3.1.40)$$

folytonos indexű diagonális mátrix ábrázolja a koordináta-reprezentációban, azaz

$$\begin{aligned} \hat{x} | \psi \rangle &\leftrightarrow \langle x, y, z | \hat{x} | \psi \rangle = \int dx' dy' dz' \langle x, y, z | \hat{x} | x', y', z' \rangle \langle x', y', z' | \psi \rangle \\ &= \int dx' dy' dz' x' \delta(x-x') \delta(y-y') \delta(z-z') \psi(x', y', z') = x \psi(x, y, z), \end{aligned} \quad (3.1.41)$$

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

$$\hat{r} | \psi \rangle \leftrightarrow \langle \vec{r} | \hat{r} | \psi \rangle = \hat{r}_{\vec{r}} \langle \vec{r} | \psi \rangle = \vec{r} \psi(\vec{r}). \quad (3.1.42)$$

Koordináta-reprezentáció. N-részecskés rendszer

Az F mennyiségnek a rendszer részecskéi helyzetvektorainak Descartes-komponenseit választjuk. Ekkor a koordinátareprezentációban a rendszer hullámfüggvénye $3N$ -változós, azaz N darab helyzetvektortól függ:

$$\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \psi \rangle \quad (3.1.43)$$

ahol

$$\hat{r}_a |\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N\rangle = \vec{r}_a |\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N\rangle, \quad a = 1, 2, \dots, N \quad (3.1.44)$$

A skalárszorzat

$$\begin{aligned} \langle \psi | \phi \rangle &= \int dx_1 \int dy_1 \int dz_1 \cdots \int dx_N \int dy_N \int dz_N \\ &\quad \psi^*(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_N, y_N, z_N) \phi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_N, y_N, z_N) \\ &= \int d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \psi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \end{aligned} \quad (3.1.45)$$

alakú és a hullámfüggvényre a normálási feltétel:

$$\int d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N |\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2 = 1. \quad (3.1.46)$$

A helyzetvektor operátorának a hatása a koordináta-hullámfüggvényre most is a helyzetvektorral történő szorzás:

$$[\hat{r}_a]_{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N} \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \vec{r}_a \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N), \quad a = 1, 2, \dots, N. \quad (3.1.47)$$

Bármely más, a koordináta-reprezentációban diagonális mátrixszal ábrázolt fizikai mennyiség várható értéke:

$$\langle \psi | \vec{f} | \psi \rangle = \int d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \psi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \hat{f}_{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N} \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N). \quad (3.1.48)$$

3.1.1 Ismétlés: fizikai mennyiségek

3.1.2 Az állapottér vektorainak lineáris ábrázolása

3.2 Összetett rendszer

3.2.1 Független részekből álló rendszer

Fogalmilag és az alkalmazások szempontjából is fontos annak a tisztázása, hogyan írhatunk le egy részekből álló fizikai rendszert.

Független részekből álló rendszer. Elegendő azt megvizsgálni, hogyan kell két részből álló rendszer állapotterét a részeinek állapotteréből megszerkeszteni. Az eljárás utána párosával kiterjeszthető tetszőlegesen sok részből álló rendszerre. Vizsgáljuk először azt az esetet, amikor a két részrendszer nem hat kölcsön egymással. Álljon pl. az U rendszer az A és a B részekből és tegyük fel, hogy ezek között semmiféle kölcsönhatás nincsen. Annak, hogy a részrendszerek között nincsen kölcsönhatás, fontos következményei vannak:

1. Léteznek egymástól függetlenül az A részrendszer és a B részrendszer állapotai, vagyis beszélhetünk külön az A ill. a B részrendszer állapotainak \mathcal{H}_A ill. \mathcal{H}_B Hilbert-teréről.
2. Létezik külön-külön az A ill. a B részrendszernek a \hat{H}_A ill. \hat{H}_B Hamilton-operátora. Ezek az operátorok rendre a \mathcal{H}_A ill. a \mathcal{H}_B állapottereken hatnak.
3. Bármilyen F fizikai mennyiség mérhető külön az egyik és a másik részrendszeren, ezért tetszőleges F fizikai mennyiségnek olyan \hat{F}_A ill. \hat{F}_B operátorok felelnek meg, amelyek rendre a \mathcal{H}_A ill. \mathcal{H}_B állapotterén hatnak és rendre az ezen állapotterekben értelmezett skalárszorzásra nézve önadjungáltak.

Az elmondottak alapján az egyesített $U = A \cup B$ rendszer állapotai között az összes $(|\phi_A\rangle, |\phi_B\rangle)$ alakú rendezett pároknak szerepelni kell, ahol a rendezett pár első ill. második vektora rendre \mathcal{H}_A ill. \mathcal{H}_B eleme. A $(|\phi_A\rangle, |\phi_B\rangle)$ alakú rendezett párok halmaza a \mathcal{H}_A és \mathcal{H}_B terek halmazelméleti értelemben vett $\mathcal{H}_A \times \mathcal{H}_B$ direkt szorzata. Megpróbálhatjuk ezen a halmazon a rendezett párok komplex számmal való szorzását és a összeadását úgy értelmezni, hogy összhangban maradjunk a lineáris szuperpozíció elvével. A rendezett állapotpárookra úgy kell értelmezni a komplex számmal való szorzást és az összeadást, hogy a részrendszerekre az állapotok lineáris szuperpozíciója érvényes legyen, azaz

$$\begin{aligned} (\lambda_1|\phi_{A1}\rangle + \lambda_2|\phi_{A2}\rangle, |\phi_B\rangle) &= \lambda_1(|\phi_{A1}\rangle, |\phi_B\rangle) + \lambda_2(|\phi_{A2}\rangle, |\phi_B\rangle), \\ (|\phi_A\rangle, \lambda_1|\phi_{B1}\rangle + \lambda_2|\phi_{B2}\rangle) &= \lambda_1(|\phi_A\rangle, |\phi_{B1}\rangle) + \lambda_2(|\phi_A\rangle, |\phi_{B2}\rangle) \end{aligned} \quad (3.2.49)$$

teljesüljenek. Ezen túlmenően az egyesített rendszer állapotaira is teljesülnie kell a lineáris szuperpozíció elvének,

azaz bármely két rendezett pár lineáris kombinációját is értelmezni kell. Ez azonban kivezet az adott halmazból. Az egyesített rendszer állapottere tehát bővebb, mint a részrendszerek állapottereinek halmazelméleti értelemben vett direkt szorzata. Az egyesített $U = A \cup B$ rendszer állapottere a részrendszerek **állapottereinek tenzori szorzata**, $\mathcal{H}_U = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, amelyet az alábbiak szerint értelmezhetünk:

1. Feleltessünk meg a $\mathcal{H}_A \times \mathcal{H}_B$ halmaz minden $(|\phi_A\rangle, |\phi_B\rangle)$ elemének egy $|\Phi_{A \cup B}\rangle \equiv |\phi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle \in \mathcal{H}_U$ elemet, ahol a \otimes tenzori szorzás műveletét, mint bilineáris műveletet értelmezzük. Ezzel eleget tettünk annak a követelménynek, hogy a részrendszerekre teljesüljön a lineáris szuperpozíció elve.
2. Követeljük meg, hogy az előző pontban értelmezett $|\phi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle$ vektorok feszítik ki a teljes $\mathcal{H}_U = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ állapotteret. Ezzel eleget tettünk az U rendszerre vonatkozóan a lineáris szuperpozíció elvének.

3. Végül értelmezzük két tetszőleges, $|\phi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle \in \mathcal{H}_U$ és $|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle \in \mathcal{H}_U$ vektor skaláris szorzatát

$$\langle \phi_A | \otimes \langle \phi_B | \psi_A \rangle \otimes |\psi_B\rangle = \langle \phi_A | \psi_A \rangle \langle \phi_B | \psi_B \rangle \quad (3.2.50)$$

a részrendszerekre vonatkozó megfelelő skaláris szorzatok alakjában.

Ha $|\phi_{A\ n}\rangle \in \mathcal{H}_A$ és $|\phi_{B\ m}\rangle \in \mathcal{H}_B$ rendre az egyes részrendszerek állapottereiben választott bázisok, akkor az egyesített rendszer egy tetszőleges állapota

$$|\psi_U\rangle = \sum_{n,m} c_{n,m} |\phi_{A\ n}\rangle \otimes |\phi_{B\ m}\rangle. \quad (3.2.51)$$

A $|\phi_{A\ n}\rangle \otimes |\phi_{B\ m}\rangle$ állapotok, ha n és m indexek az összes lehetséges értékeiket be futják, akkor ortonormált bázist alkotnak a $\mathcal{H}_U = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ tenzori szorzattérben. Nyilvánvaló azonban az is, hogy tetszőleges $c_{n,m}$ komplex együtthatók esetén a $|\psi_U\rangle$ állapot általában nem írható $|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ **szeperábilis** alakba. Az egyesített rendszernek vannak **nem szeperábilis, más néven összefonódott állapotai** is. Pontosan ezeknek az állapotoknak köpszőnhetően bővebb a tenzori szorzat tér a két tényező tér halmazelméleti direkt szorzatánál.

A skalárszorzat értelmezésének fizikai tartalma az, hogy annak a valószínűségi amplitudója, hogy a $|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ szeperábilis állapotban megtaláljuk a $|\phi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle$ szeperábilis állapotot, azon valószínűségi amplitudók szorzata, hogy az A részrendszer $|\psi_A\rangle$ állapotában megtaláljuk a $|\phi_A\rangle$ állapotot és hogy a B részrendszer $|\psi_B\rangle$ állapotában megtaláljuk a $|\phi_B\rangle$ állapotot, azaz hogy ilyenkor az egyes részrendszerekre vonatkozó, független valószínűségi amplitudók összeszorzódnak.

Képezzük most egy tetszőleges, szeperábilis, azaz tenzori szorzat alakú állapot idő szerinti parciális deriváltját:

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t|\Psi\rangle &= i\hbar\partial_t(|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle) = i\hbar[(\partial_t|\psi\rangle) \otimes |\phi\rangle + |\psi\rangle \otimes (\partial_t|\phi\rangle)] \\ &= (\hat{H}_A|\psi\rangle) \otimes |\phi\rangle + |\psi\rangle \otimes (\hat{H}_B|\phi\rangle) = [\hat{H}_A \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{H}_B]|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle \\ &= [\hat{H}_A \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{H}_B]|\Psi\rangle, \end{aligned} \quad (3.2.52)$$

adódik, miután felhasználtuk a részrendszerekre vonatkozó Schrödinger-egyenleteket. A kapott egyenlet az egyesített rendszerre vonatkozó Schrödinger-egyenlet, amelyből azonosíthatjuk az egymással kölcsön nem ható részekből álló rendszer Hamilton-operátorát

$$\hat{H}_U = \hat{H}_A \otimes \hat{1}_B + \hat{1}_A \otimes \hat{H}_B \quad (3.2.53)$$

alakban.

A kölcsön nem ható részekből álló egyesített rendszer Schrödinger-egyenlete tehát általában

$$[\hat{H}_A \otimes \hat{1}_B + \hat{1}_A \otimes \hat{H}_B]|\Psi\rangle = i\hbar\partial_t|\Psi\rangle \quad (3.2.54)$$

alakú. Ennek a fentiek alapján, minden olyan szeparábilis $|\Psi\rangle = |\phi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle$ állapot megoldása, ahol a tényezők megoldásai a független részrendszerekre vonatkozó

$$\hat{H}_A|\phi_A\rangle = i\hbar\partial_t|\phi_A\rangle, \quad \hat{H}_B|\phi_B\rangle = i\hbar\partial_t|\phi_B\rangle \quad (3.2.55)$$

Schrödinger-egyenleteknek. Az egyesített rendszerre vonatkozó Schrödinger-egyenletnek azonban van végtelen sok nem szeparábilis megoldása is, mert bármely két szeparábilis megoldás lineáris kombinációja is megoldás.

A fizikában rendszerint a rövidség kedvéért a részrendszerek állapotterei felett ható egységoperátorokat 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

$$\hat{F}_U = \hat{F}_A \otimes \hat{1}_B + \hat{1}_A \otimes \hat{F}_B \quad (3.2.56)$$

alakú.

Kölcsönható részekből álló rendszer

Kölcsönható részekből álló rendszerről akkor tudunk beszélni, ha van annak értelme, hogy a részrendszerekről a köztük lévő kölcsönhatástól eltekintve beszéljünk. Ekkor fenntartható az, hogy a részrendszereknek van saját Hamilton-operátoruk és állapotterük. Kézenfekvő ekkor azt is elfogadni, hogy 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 szeparábilis állapotot:

$$|\Psi_{n,m}\rangle \equiv |\psi_n\rangle \otimes |\phi_m\rangle. \quad (3.2.57)$$

Így ortonormált bázist kaptunk, amely a teljes $\mathcal{H}_U = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ tenzori szorzatteret kifeszíti. A tenzori szorzattérben nyilvánvalóan nemcsak szeparábilis állapotok vannak, mert a $|\Psi_{n,m}\rangle$ bázisvektorok tetszőleges lineáris kombinációja is benne van.

Általában fel szoktuk tenni, hogy **az A és B részekből álló rendszer teljes állapottere a részrendszerek állapottereinek tenzori szorzata** akkor is, ha a részrendszerek kölcsönhatásban állnak egymással. Ilyenkor azonban a teljes rendszer állapotvektora nem lesz a részrendszerek állapotvektoraiban szeparábilis és a teljes rendszer Hamilton-operátora sem 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:

$$\hat{H}_{A \cup B} = \hat{H}_A \otimes \hat{1}_B + \hat{1}_A \otimes \hat{H}_B + \hat{H}_{AB}. \quad (3.2.58)$$

Az azonban igaz, hogy az $A \cup B$ egyesített rendszer tetszőleges $|\Psi\rangle$ állapota előállítható a bevezetett ortonormált bázis lineáris szuperpozíciójaként:

$$|\Psi\rangle = \sum_{n,m} c_{n,m} |\psi_n\rangle \otimes |\phi_m\rangle, \quad (3.2.59)$$

ahol a lineárkombinációs együtthatók:

$$c_{n,m} = \langle \Psi_{n,m} | \Psi \rangle. \quad (3.2.60)$$

Összetett rendszer hullámfüggvénye. Koordináta-reprezentációban a fentiek a következő alakot öltik. Legyenek $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A}$ az A rendszer, $\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B}$ pedig a B rendszer részecskéinek helyzetvektorai. Ekkor az egyes részrendszerek hullámfüggvényei rendre

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A}) &= \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A} | \psi \rangle, \\ \phi(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B}) &= \langle \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B} | \phi \rangle, \end{aligned} \quad (3.2.61)$$

ahol

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A} | &= \langle \vec{r}_1 | \otimes \dots \otimes \langle \vec{r}_{N_A} |, \\ \langle \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B} | &= \langle \vec{R}_1 | \otimes \dots \otimes \langle \vec{R}_{N_B} |. \end{aligned} \quad (3.2.62)$$

Az egyes részrendszerek \hat{H}_A ill. \hat{H}_B Hamilton-operátorai ebben a reprezentációban csak rendre az $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A}$ változók, ill. a $\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B}$ változók függvényeire hatnak. Ha nincsen a két részrendszer egymással kölcsönhatásban, akkor az egyesített rendszer Hamilton-operátora ezen két operátor összege. Az egyesített rendszernek vannak szeparábilis állapotai. A szeparábilis állapotoknak megfelelő hullámfüggvények pedig az egyes részrendszerek hullámfüggvényeinek a szorzatai:

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A}, \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B}) &= \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A}, \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B} | \Psi \rangle \\ &= \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A} | \psi \rangle \langle \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B} | \phi \rangle = \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A}) \phi(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B}). \end{aligned} \quad (3.2.63)$$

Ha a két részrendszer kölcsönhatásban van egymással, akkor általában $\hat{H}_U = \hat{H}_A + \hat{H}_B + \hat{H}_{A,B} \neq \hat{H}_A + \hat{H}_B$, mert tartalmazza a részek közötti kölcsönhatás $\hat{H}_{A,B}$ Hamilton-operátorát, amely sem az A sem a B részrendszer állapotainak \mathcal{H}_A ill. \mathcal{H}_B alterén nem egységoperátorként viselkedik. Az $U = A \cup B$ egyesített rendszer tetszőleges hullámfüggvénye az egyes részrendszerek bázishullámfüggvényei szorzatainak valamilyen lineáris kombinációja:

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A}, \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B}) &= \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A}, \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B} | \Psi \rangle \\ &= \sum_{n,m} c_{n,m} \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A} | \psi_n \rangle \langle \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B} | \phi_m \rangle \\ &= \sum_{n,m} c_{n,m} \psi_n(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A}) \phi_m(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B}), \end{aligned} \quad (3.2.64)$$

ahol $|\psi_n\rangle$ ill. $|\phi_m\rangle$ rendre az A ill. a B részrendszer \mathcal{H}_A ill. \mathcal{H}_B állapotterében választott teljes rendszerek.

Általában tehát azt mondhatjuk, hogy az A ill. a B részrendszer állapotainak tere az N_A ill. az N_B változós négyzetesen integrálható függvények terei, míg az egyesített rendszer állapotait leíró hullámfüggvények tere a részrendszerekhez tartozó függvényterek tenzori szorzata, ami az $N_A + N_B$ változós, négyzetesen integrálható függvények tere.

Összetett rendszer időtől függő Schrödinger-egyenlete. Tegyük fel, hogy a \hat{H}_A ill. \hat{H}_B Hamilton-operátorok függetlenek az időtől, míg a kölcsönhatás Hamilton-operátora $\hat{H}_{A,B}(t)$ függ az időtől. Ekkor a megválaszthatjuk a \mathcal{H}_A ill. \mathcal{H}_B állapotterekben a bázisállapotok teljes rendszereit, mint rendre a \hat{H}_A ill. a \hat{H}_B Hamilton-operátorok sajátvektorait, azaz mint stacionárius állapotokat,

$$\hat{H}_A|\psi_n\rangle = E_{A\ n}|\psi_n\rangle, \quad \hat{H}_B|\phi_m\rangle = E_{B\ m}|\phi_m\rangle, \quad (3.2.65)$$

ahol a sajátállapotok időfüggését rendre a $e^{-\frac{i}{\hbar}E_{A\ n}t}$ ill. $e^{-\frac{i}{\hbar}E_{B\ m}t}$ fázisfaktorok írják le. Ekkor az $U = A \cup B$ egyesített rendszer Schrödinger-egyenlete

$$\begin{aligned} & i\hbar\partial_t \sum_{n,m} c_{n,m}(t)\psi_n(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A}; t)\phi_m(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B}; t) \\ &= [\hat{H}_A + \hat{H}_B + \hat{H}_{A,B}(t)] \sum_{n,m} c_{n,m}(t)\psi_n(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A}; t)\phi_m(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B}; t), \\ & \sum_{n,m} \left[i\hbar \frac{dc_{n,m}(t)}{dt} + (E_{A\ n} + E_{B\ m})c_{n,m}(t) \right] \psi_n(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A}; t)\phi_m(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B}; t) \\ &= \sum_{n,m} c_{n,m}(t) \left[E_{A\ n} + E_{B\ m} + \hat{H}_{A,B}(t) \right] \psi_n(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A}; t)\phi_m(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B}; t), \\ & \sum_{n',m'} i\hbar \frac{dc_{n',m'}(t)}{dt} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{A\ n'} + E_{B\ m'})t} \varphi_{A\ n'}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A})\varphi_{B\ m'}(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B}) \\ &= \sum_{n',m'} c_{n',m'}(t) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{A\ n'} + E_{B\ m'})t} \hat{H}_{A,B}(t) \varphi_{A\ n'}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A})\varphi_{B\ m'}(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B}), \end{aligned} \quad (3.2.66)$$

ahol $\varphi_{A\ n}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A})$ ill. $\varphi_{B\ m}(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B})$ jelöli rendre az A ill. B rendszer időtől független, stacionárius hullámfüggvényeit. Kényelmi szempontból a későbbiek céljára vesszövel láttuk el az összegző indexeket. Szorozzuk most az egyenlet mindkét oldalát balról skalárisan a $|\varphi_{A\ n}\rangle \otimes |\varphi_{B\ m}\rangle$ stacionárius, időtől független állapotvektorral. Felhasználva a stacionárius állapotok ortonormáltságát, az alábbi csatolt, elsőrendű, közönséges differenciálegyenletrendszert kapjuk az egyesített $U = A \cup B$ rendszer hullámfüggvényének stacionárius állapotok szerinti kifejtésében szereplő $c_{n,m}(t)$ együtthatók időfüggésére:

$$i\hbar \frac{dc_{n,m}(t)}{dt} = \sum_{n',m'} (H_{A,B})_{(n,m),(n',m')}(t) c_{n',m'}(t), \quad (3.2.67)$$

ahol a kölcsönhatás $\hat{H}_{A,B}$ Hamilton-operátorának időtől független stacionárius állapotok szerinti

$$(H_{A,B})_{(n,m),(n',m')}(t) = \int d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_{N_A} d\vec{R}_1 \cdots d\vec{R}_{N_B} \varphi_{A n}^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A}) \varphi_{B m}^*(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B}) \hat{H}_{A,B}(t) \varphi_{A n'}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A}) \varphi_{B m'}(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B}) = \langle n, m | \hat{H}_{A,B} | n', m' \rangle \quad (3.2.68)$$

mátrixelemei szerepelnek az egyenletek jobb oldalán. Ezt az egyenletrendszert adott kezdeti állapot, azaz adott kezdeti feltétel, azaz a $c_{n,m}(t)$ együtthatók adott kezdeti $c_{n,m}(0)$ értékei mellett kell általában megoldani ahhoz, hogy tetszőleges kezdeti állapot időbeli fejlődését megkapjuk. Az időbeli fejlődés feladatát, amely eredetileg egyetlen parciális differenciálegyenlet megoldását követelte adott kezdeti feltétellel, most átfogalmaztuk lineáris differenciálegyenletrendszer adott kezdeti feltétellel történő megoldására. Ez azért előnyös, mert a numerikus megoldáshoz ezt az egyenletrendszert differenciaegyenletrendszerré alakítjuk át, amely numerikusan, pl. iterációval sokkal könnyebben megoldható:

$$c_{n,m}(t + \tau) = c_{n,m}(t) - \frac{i}{\hbar} \tau \sum_{n',m'} (H_{A,B})_{(n,m),(n',m')}(t) c_{n',m'}(t), \quad (3.2.69)$$

ahol τ az időlépés. Az egyetlen nehézséget az jelenti, hogy a végtelen sok egyenletből álló egyenletrendszert, vagyis az (általában) végtelen bázist a gyakorlatban csonkítani kell.

Az egyesített rendszer hullámfüggvény normája 1, és az is marad az időbeli fejlődés során, mert azt unitér operátor írja le. Ebből következik, hogy a kezdeti feltételnek ki kell elégítenie a

$$\sum_{n,m} |c_{n,m}(0)|^2 = 1 \quad (3.2.70)$$

normálási feltételt. Ha azonban ez kielégül, akkor az időfüggő probléma (egzakt) megoldása ezt tetszőleges pillanatban kielégíti, azaz

$$\sum_{n,m} |c_{n,m}(t)|^2 = 1 \quad (3.2.71)$$

tetszőleges t időpillanatban fenn fog állni. Természetesen, ha numerikusan oldjuk meg a feladatot, akkor a diszkrétizálásból adódó hiba miatt elromolhat a normálási feltétel. A pontosság növelése (az unitaritás visszaállítása) érdekében ezért a normálást minden időlépés után újra elvégezni.

Összetett rendszer stacionárius állapotai. Amennyiben a rendszer részei közötti kölcsönhatás $\hat{H}_{A,B}$ Hamilton-operátora független az időtől, akkor az egész $U = A \cup B$ rendszer \hat{H}_U Hamilton-operátora független az időtől. Ilyenkor az $U = A \cup B$ rendszer Schrödinger-egyenletének vannak $\Phi_{A \cup B \nu}$ stacionárius megoldásai, amelyek rendre az $E_{A \cup B \nu}$ sajátértékekhez tartoznak:

$$\hat{H}_{A \cup B} \Phi_{A \cup B \nu} = E_{A \cup B \nu} \Phi_{A \cup B \nu}. \quad (3.2.72)$$

Természetesen a $\Phi_{A \cup B \nu}$ időtől független hullámfüggvényeket is kifejezhetjük a $\varphi_{A n} \varphi_{B m}$ szorzatok teljes rendszere szerint:

$$\Phi_{A \cup B \nu}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A}, \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B}) = \sum_{n', m'} c_{n', m'}^{[\nu]} \varphi_{A n'}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A}) \varphi_{B m'}(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B}). \quad (3.2.73)$$

Ekkor a stacionárius Schrödinger-egyenlet:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{A \cup B} \sum_{n', m'} c_{n', m'}^{[\nu]} \varphi_{A n'}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A}) \varphi_{B m'}(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B}) \\ = E_{A \cup B \nu} \sum_{n', m'} c_{n', m'}^{[\nu]} \varphi_{A n'}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_A}) \varphi_{B m'}(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_B}) \end{aligned} \quad (3.2.74)$$

alakot ölt. Ennek mindkét oldalát skalárisan szorozva balról a $|\varphi_{A n''}\rangle |\varphi_{B m''}\rangle$ állapotvektorral és kihasználva a bázisvektorok ortonormáltságát, az alábbi homogén lineáris egyenletrendszert kapjuk a $c_{n', m'}^{[\nu]}$ együtthatókra:

$$\left[(H_{A \cup B})_{(n'', m''), (n', m')} - E_{A \cup B \nu} \delta_{n'', n'} \delta_{m'', m'} \right] c_{n', m'}^{[\nu]} = 0. \quad (3.2.75)$$

A kapott homogén lineáris egyenletnek akkor és csak akkor létezik nem triviális (nem azonosan eltűnő, $c_{n', m'}^{[\nu]} \neq 0$) megoldása, ha az egyenletrendszer determinánsa zérus, azaz

$$\text{Det} \left[(H_{A \cup B})_{(n'', m''), (n', m')} - \lambda \delta_{n'', n'} \delta_{m'', m'} \right] = 0. \quad (3.2.76)$$

Ez a probléma **szekuláris egyenlete**. Ennek az algebrai egyenletnek annyi darab $\lambda_\nu = E_{A \cup B \nu}$ van, amennyi dimenziós a $(H_{A \cup B})_{(n'', m''), (n', m')}$ mátrix, azaz az egyesített rendszer Hilbert-tere. A szekuláris egyenlet megoldásai tehát az egyesített rendszer energiasajátértékei. A megfelelő állapotokat úgy kapjuk meg, hogy adott $E_{A \cup B \nu}$ sajátértékkel megoldjuk a $c_{n', m'}^{[\nu]}$ együtthatókra vonatkozó homogén lineáris egyenletrendszert. Az egyesített rendszer hullámfüggvényének normája 1, úgyhogy a

$$\sum_{n', m'} |c_{n', m'}^{[\nu]}|^2 = 1 \quad (3.2.77)$$

normálási feltételt kielégítő megoldást kell megkeresnünk. (A gyakorlatban tetszőleges normájú megoldást keresünk meg, amelyet utólag normálunk 1-re.)

Röviden fogalmazva, összetett rendszer stacionárius állapotait úgy kereshetjük meg, hogy megkeressük a Hamilton-operátor mátrixát mondjuk a részrendszerek stacionárius állapotainak direkt szorzásával kapott bázisban, majd diagonalizáljuk azt.¹⁹

¹⁹Általában bármilyen, időtől független \hat{H} Hamilton-operátor sajátérték-problémájának megoldása, azaz a stacionárius állapotok megkeresése, mindig azt jelenti, hogy megkeressük \hat{H}

mátrixát valamilyen bázisban, majd diagonalizáljuk ezt a mátrixot. A sajátérték-feladat

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (3.2.78)$$

alakú. Vezessük be a tetszőleges $|\phi_j\rangle$ bázist a \hat{H} Hamilton-operátorral leírt fizikai rendszer állapotainak \mathcal{H} terében. Skalárisan szorozva a sajátértékegyenlet mindkét oldalát balról valamely $|\phi_j\rangle$ állapottal, majd a bal oldalon a Hamilton-operátor és a $|\psi\rangle$ állapotvektor közé „beszúrva” a $\hat{1} = \sum_l |\phi_l\rangle\langle\phi_l|$ egységoperátort, a sajátérték-feladat a Hamilton-operátor mátrixa sajátértékeinek és sajátvektorainak a megkeresésének feladatává fogalmazható át:

$$\begin{aligned} \sum_l \langle\phi_j|\hat{H}|\phi_l\rangle\langle\phi_l|\psi\rangle &= E\langle\phi_j|\psi\rangle, \\ \sum_l H_{j,l}c_l &= Ec_j, \end{aligned} \quad (3.2.79)$$

ahol $c_j = \langle\phi_j|\psi\rangle$ annak az amplitudója, hogy a $|\psi\rangle$ állapotban jelen van a j -edik bázisállapot.

A c_j együtthatókra kapott homogén lineáris egyenletrendszernek akkor és csak akkor van nem triviális megoldása, ha az egyenletrendszer determinánsa zérus, azaz ha E olyan érték, amelyre

$$\det [H_{j,l} - E\delta_{j,l}] = 0. \quad (3.2.80)$$

Ha az állapotok tere N dimenziós, akkor a bázis N elemű (többnyire végtelen, de a gyakorlatban mindig véges sok bázisállapotot tudunk csak figyelembe venni). Az $N \times N$ -es mátrix determinánsának eltűnése, N -edrendű algebrai egyenlet, amelynek N darab független E_n ($n = 1, 2, \dots, N$) megoldása van, ezek a rendszer energiasajátértékei. Tetszőleges, n -edik E_n energiasajátértékhez tartozó $|\varphi_n\rangle$ energiasajátállapotot úgy kapjuk meg, hogy megoldjuk c_j -kre a

$$\sum_l H_{j,l}c_l = E_n c_j, \quad (3.2.81)$$

homogén lineáris egyenletrendszert, megkövetelve az állapot normáltságát, $\sum_j |c_j|^2 = 1$. Ha az így kapott megoldást (amely létezik és nem triviális, mert $E = E_n$ esetén az egyenletrendszer determinánsa zérus) $c_j^{[n]}$ jelöli, akkor az E_n sajátértékhez tartozó sajátállapot

$$|\varphi_n\rangle = \sum_j c_j^{[n]} |\phi_j\rangle \quad (3.2.82)$$

alakban áll elő a választott $|\phi_j\rangle$ bázisban. Ha a bázist csonkítottuk, akkor meg kell vizsgálni, hogy a kapott energiasajátértékek és sajátvektorok mennyire változnak, ha N -et növeljük.

3.2.2 Kölcsönható részekből álló rendszer

3.3 A hullámfüggvény koordináta-reprezentációjában

3.3.1 Pontrészcseke

3.3.2 N -részcsekes rendszer

3.3.3 A helykoordináta és az impulzus

A helykoordináta operátorának sajátfüggvényei

Megállapítottuk, hogy koordináta-reprezentációban a Descartes-koordináta operátorát a

$$\langle x' | \hat{x} | x \rangle = x \delta(x - x') \quad (3.3.83)$$

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

$$\hat{x} \psi(x) = x \psi(x). \quad (3.3.84)$$

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

$$\hat{x} \psi_{x_0}(x) = x_0 \psi_{x_0}(x) \quad (3.3.85)$$

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:

$$\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0), \quad (3.3.86)$$

hiszen

$$x \psi_{x_0}(x) = x \delta(x - x_0) = x_0 \delta(x - x_0). \quad (3.3.87)$$

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**:

$$\int dx \psi_{x'_0}^*(x) \psi_{x_0}(x) = \delta(x_0 - x'_0) \quad (3.3.88)$$

ugyanis

$$\int dx \delta(x - x'_0) \delta(x - x_0) = \delta(x_0 - x'_0) \int dx \delta(x - x_0) = \delta(x_0 - x'_0). \quad (3.3.89)$$

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

$$\psi(x) = \int dx' \delta(x - x') \psi(x') = \int dx' \psi(x') \psi_{x'}(x), \quad (3.3.90)$$

ahol

$$\psi(x') = \int_x \psi_{x'}^*(x) \psi(x) \quad (3.3.91)$$

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

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:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar. \quad (3.3.92)$$

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

$$\int dx'' (\langle x | \hat{x} | x'' \rangle \langle x'' | \hat{p}_x | x' \rangle - \langle x | \hat{p}_x | x'' \rangle \langle x'' | \hat{x} | x' \rangle) = i\hbar \delta(x' - x). \quad (3.3.93)$$

Behelyettesítve a koordinátaoperátor ismert mátrixelemét,

$$\int dx'' [\delta(x - x'') x \langle x'' | \hat{p}_x | x' \rangle - \langle x | \hat{p}_x | x'' \rangle \delta(x'' - x') x'] = i\hbar \delta(x' - x), \quad (3.3.94)$$

azaz

$$(x - x') \langle x | \hat{p}_x | x' \rangle = i\hbar \delta(x' - x) \quad (3.3.95)$$

adódik. Ennek a megoldása

$$\langle x | \hat{p}_x | x' \rangle = -\frac{\hbar}{i} \partial_{x'} \delta(x' - x) \quad (3.3.96)$$

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

$$\begin{aligned} - \int dx' (x - x') \frac{\hbar}{i} [\partial_{x'} \delta(x' - x)] \psi(x') &= \frac{\hbar}{i} \int dx' \delta(x' - x) \partial_{x'} [(x - x') \psi(x')] \\ &= -i\hbar \int dx' \delta(x' - x) [(x - x') \partial_{x'} \psi(x') - \psi(x')] \\ &= i\hbar \int dx' \delta(x' - x) \psi(x'). \end{aligned} \quad (3.3.97)$$

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

$$\begin{aligned} \int dx' \langle x | \hat{p}_x | x' \rangle \psi(x') &= \int dx' \left[-\frac{\hbar}{i} \partial_{x'} \delta(x' - x) \right] \psi(x') = \\ &= \frac{\hbar}{i} \int dx' \delta(x' - x) \partial_{x'} \psi(x') = \frac{\hbar}{i} \partial_x \psi(x) \equiv \hat{p}_x \psi(x). \end{aligned} \quad (3.3.98)$$

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

Az impulzus Descartes-komponense operátorának sajátfüggvényei

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

$$\hat{p}_x \psi_{p_{x0}}(x) = p_{x0} \psi_{p_{x0}}(x). \quad (3.3.99)$$

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

$$\psi_{p_{x0}}(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar} p_{x0} x} \quad (3.3.100)$$

Ezek az impulzus-sajátfüggvények teljesítenek egy általánosított ortonormáltsági feltételt:

$$\int dx \psi_{p'_{x0}}^*(x) \psi_{p_{x0}}(x) = \delta(p'_{x0} - p_{x0}). \quad (3.3.101)$$

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

$$\psi(x) = \int dp_x C(p_x) \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}, \quad (3.3.102)$$

ahol

$$C(p_x) = \int dx \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{i}{\hbar} p_x x} \psi(x). \quad (3.3.103)$$

Az impulzusoperátor jelentése

Az x -irányú impulzuskomponensre kapott eredmények általánosíthatók tetszőleges Descartes-komponensre:

$$\hat{p}_j = \frac{\hbar}{i} \partial_j, \quad j = 1, 2, 3 \quad (3.3.104)$$

avagy tömörebben

$$\vec{\hat{p}} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}}, \quad (3.3.105)$$

és - mivel az egyes parciális deriválások sorrendje felcserélhető többváltozós hullámfüggvények esetén, -azért a triviális $[\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0$ csererelációk is

kielégülnek. 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

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar}\vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}\psi(\vec{r}) &= \vec{a} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}}\psi(\vec{r}) \\ &= \psi(\vec{r} + \vec{a}) - \psi(\vec{r}) + \mathcal{O}(a^2), \end{aligned} \quad (3.3.106)$$

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.

Másrésztől, ha a fizikai rendszer a térbeli eltolásokkal szemben invariáns, akkor a Hamilton-operátora nem változik meg térbeli eltolások során: $\hat{H} = \hat{H}'$, ahol \hat{H}' a rendszer Hamilton-operátora a vonatkoztatási rendszer térbeli eltolása után. Mivel az eredeti és a térben eltolt rendszer minden átmeneti amplitudójának meg kell egyeznie, azért

$$\langle \phi | \hat{H} | \psi \rangle = \langle \phi' | \hat{H}' | \psi' \rangle \quad (3.3.107)$$

összefüggés kell teljesüljön tetszőleges $|\phi\rangle$ és $|\psi\rangle$ állapotvektorokra, ahol

$$|\psi'\rangle = |\psi\rangle + \frac{i}{\hbar}\vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}|\psi\rangle \quad (3.3.108)$$

az állapotvektor az infinitezimális eltolás után. Innen a Hamilton-operátor transzformációja infinitezimális eltolás során

$$\hat{H} - \hat{H}' = \frac{i}{\hbar}\vec{a} \cdot [\hat{\vec{p}}, \hat{H}] \quad (3.3.109)$$

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

$$[\hat{\vec{p}}, \hat{H}] = 0. \quad (3.3.110)$$

Ha tehát a pont részecske (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 impulzusoperátor olyan, vektorjellegű fizikai mennyiség operátora, amely a térbeli eltolási szimmetria következtében marad meg. Joggal nevezzük tehát ezt az operátort az impulzus operátorának.

Részecskerendszer teljes impulzusa

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:

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}_1 + \vec{a}, \dots, \vec{r}_N + \vec{a}) - \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) &= \sum_{a=1}^N \vec{a} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}_a} \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \\ &= \frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \left(\sum_{a=1}^N \hat{\vec{p}}_a \right) \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N).\end{aligned}\quad (3.3.111)$$

Innen látjuk, hogy az egy-részecskés rendszer impulzusával analóg helyzetben most a

$$\hat{\vec{P}} = \sum_{a=1}^N \hat{\vec{p}}_a \quad (3.3.112)$$

operátort találjuk. **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 vektorát az egyes részecskék impulzusvektorainak vektori összegeként kell megkapni.

3.3.4 A pályaimpulzusmomentum

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**

$$\hat{\vec{\ell}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \quad (3.3.113)$$

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:**

$$[\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y] = i\hbar \hat{\ell}_z, \quad [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_x] = i\hbar \hat{\ell}_y, \quad [\hat{\ell}_y, \hat{\ell}_z] = i\hbar \hat{\ell}_x. \quad (3.3.114)$$

Ezeket összefoglalva

$$[\hat{\ell}_j, \hat{\ell}_k] = i\hbar \sum_{l=1}^3 \epsilon_{j,k,l} \hat{\ell}_l \quad (3.3.115)$$

alakban írhatjuk, ahol

$$\epsilon_{j,k,l} = \begin{cases} +1, & \text{ha } (j, k, l) = (1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2) \\ -1, & \text{ha } (j, k, l) = (3, 2, 1), (2, 1, 3), (1, 3, 2) \\ 0, & \text{egyébként} \end{cases} \quad (3.3.116)$$

A csererelációk

$$\begin{aligned}
[\hat{\ell}_j, \hat{\ell}_k] &= \sum_{j', j'', k', k''=1}^3 \left[\epsilon_{j, j', j''} \hat{x}_{j'} \hat{p}_{j''}, \epsilon_{k, k', k''} \hat{x}_{k'} \hat{p}_{k''} \right] \\
&= \sum_{j', j'', k', k''=1}^3 \epsilon_{j, j', j''} \epsilon_{k, k', k''} \left[\hat{x}_{j'} \hat{p}_{j''} \hat{x}_{k'} \hat{p}_{k''} - \hat{x}_{k'} \hat{p}_{k''} \hat{x}_{j'} \hat{p}_{j''} \right] \\
&= \sum_{j', j'', k', k''=1}^3 \epsilon_{j, j', j''} \epsilon_{k, k', k''} \left[\hat{x}_{j'} (\hat{x}_{k'} \hat{p}_{j''} - i\hbar \delta_{k', j''}) \hat{p}_{k''} - \hat{x}_{k'} (\hat{x}_{j'} \hat{p}_{k''} - i\hbar \delta_{j', k''}) \hat{p}_{j''} \right] \\
&= -i\hbar \sum_{j', k', k''=1}^3 \epsilon_{j, j', k'} \epsilon_{k'', k, k'} \hat{x}_{j'} \hat{p}_{k''} + i\hbar \sum_{j', j'', k'=1}^3 \epsilon_{j'', j, j'} \epsilon_{k, k', j'} \hat{x}_{k'} \hat{p}_{j''} \\
&= -i\hbar \sum_{j', k''=1}^3 (\delta_{j, k''} \delta_{j', k} - \delta_{j, k} \delta_{k'', j'}) \hat{x}_{j'} \hat{p}_{k''} + i\hbar \sum_{j'', k'=1}^3 (\delta_{j'', k} \delta_{j, k'} - \delta_{j'', k'} \delta_{k, j}) \hat{x}_{k'} \hat{p}_{j''} \\
&= i\hbar [-\hat{x}_k \hat{p}_j + \hat{x}_j \hat{p}_k] + i\hbar \delta_{j, k} \left[\sum_{j'}^3 \hat{x}_{j'} \hat{p}_{j'} - \sum_{k'=1}^3 \hat{x}_{k'} \hat{p}_{k'} \right] \\
&= i\hbar [\hat{x}_j \hat{p}_k - \hat{x}_k \hat{p}_j] = i\hbar \epsilon_{j, k, l} \hat{\ell}_l. \tag{3.3.117}
\end{aligned}$$

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

$$\hat{\ell}_x = \frac{\hbar}{i} (y \partial_z - z \partial_y), \quad \hat{\ell}_y = \frac{\hbar}{i} (z \partial_x - x \partial_z), \quad \hat{\ell}_z = \frac{\hbar}{i} (x \partial_y - y \partial_x), \tag{3.3.118}$$

amit tömörebben

$$\vec{\hat{\ell}} = \frac{\hbar}{i} \vec{r} \times \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \tag{3.3.119}$$

alakban is írhatunk.

Pontrészecske pályaimpulzusmomentum-operátorainak jelentése

Megmutatjuk, hogy a pályaimpulzusmomentum operátorai a vonatkoztatási rendszer infinitezimális elforgatásait generálják.

Vizsgáljuk meg ezeknek az operátoroknak 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

$$\begin{aligned}
\delta\psi(\vec{r}) &\equiv \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^3 \delta\varphi_j \hat{\ell}_j \psi(\vec{r}) \\
&= \delta\vec{\varphi} \cdot \left(\vec{r} \times \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \right) \\
&= \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \cdot (\delta\vec{\varphi} \times \vec{r}) \\
&= \psi(\vec{r} + \delta\vec{\varphi} \times \vec{r}) - \psi(\vec{r}) + \mathcal{O}((\delta\varphi)^2) \\
&= \psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) - \psi(\vec{r}) + \mathcal{O}((\delta\varphi)^2) \tag{3.3.120}
\end{aligned}$$

függvényt eredményezi, ami úgy fogható fel, mint a hullámfüggvény infinitezimális megváltozása, ha a $\delta\vec{\varphi} = \vec{n}\delta\varphi$ vektor irányába mutató \vec{n} egységvektor körül infinitezimális $\delta\varphi$ szöggel elforgatjuk a vonatkoztatási rendszert. Az impulzusmomentum $\hat{\vec{\ell}}$ operátora tehát a hullámfüggvény megváltozását generálja infinitezimális elforgatások során.

Pontrészecske pályaimpulzusmomentumának megmaradása

Ha a fizikai rendszer invariáns a térbeli elforgatásokkal szemben, akkor a rendszer \hat{H} Hamilton-operátora invariáns az elforgatásokkal szemben. Legyen \hat{H}' az elforgatott rendszer operátora. 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. Fentebb megkaptuk, hogy a pályaimpulzusmomentum operátora szabja meg, hogyan transzformálódnak az állapotok. Az operátoroknak (így a Hamilton-operátornak is) úgy kell transzformálódnuk, hogy az összes átmeneti amplitudó azonos maradjon az eredeti és az elforgatott rendszerben. Tehát tetszőleges $|\psi\rangle$ és $|\phi\rangle$ állapotok esetén

$$\langle\phi|\hat{H}|\psi\rangle = \langle\phi'|\hat{H}'|\psi'\rangle \quad (3.3.121)$$

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

$$|\psi'\rangle = |\psi\rangle + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi} \cdot \hat{\vec{\ell}}|\psi\rangle. \quad (3.3.122)$$

A (3.3.121) feltétel ezért az alábbi egyenletre vezet,

$$\hat{H} - \hat{H}' = -\frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi} \cdot \hat{\vec{\ell}}\hat{H} + \hat{H}\frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi} \cdot \hat{\vec{\ell}} \quad (3.3.123)$$

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

$$[\hat{\vec{\ell}}, \hat{H}] = 0, \quad (3.3.124)$$

azaz **forgásszimmetrikus, egyetlen (zérus spinű) részecskéből álló rendszer Hamilton-operátora felcserélhető a részecske pályaimpulzusmomentumának az operátorával**²⁰. Mivel a pályaimpulzusmomentum operátora nem függ explicit módon az időtől²¹, a

$$[\hat{\ell}_j, \hat{H}] = 0, \quad j = 1, 2, 3 \quad (3.3.125)$$

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.

²⁰Az ilyen rendszer vagy a szabad pontrészecske, vagy forgásszimmetrikus külső térben mozgó pontrészecske

²¹Sem a pályaimpulzusmomentum, sem a Hamilton-operátor nem függ explicit módon az időtől, ha a forgásszimmetrikus külső tér nem függ az időtől.

A pályaimpulzusmomentum négyzete

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

$$\hat{\vec{\ell}}^2 \equiv \hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 + \hat{\ell}_z^2 \quad (3.3.126)$$

felcserélhető az impulzusmomentum valamennyi komponensével:

$$[\hat{\vec{\ell}}^2, \hat{\ell}_i] = 0, \quad i = x, y, z \quad (3.3.127)$$

Képezzük az alábbi kommutátorokat:

$$\begin{aligned} [\hat{\ell}_j, \hat{\ell}_k^2] &= \hat{\ell}_j \hat{\ell}_k^2 - \hat{\ell}_k^2 \hat{\ell}_j \\ &= \hat{\ell}_j \hat{\ell}_k^2 - \hat{\ell}_k (i\hbar \sum_l \epsilon_{k,j,l} \hat{\ell}_l + \hat{\ell}_j \hat{\ell}_k) \\ &= -i\hbar \sum_l \epsilon_{k,j,l} \hat{\ell}_k \hat{\ell}_l + \hat{\ell}_j \hat{\ell}_k^2 - (i\hbar \sum_l \epsilon_{k,j,l} \hat{\ell}_l \hat{\ell}_k + \hat{\ell}_j \hat{\ell}_k^2) \\ &= -i\hbar \sum_l \epsilon_{k,j,l} (\hat{\ell}_k \hat{\ell}_l + \hat{\ell}_l \hat{\ell}_k), \end{aligned} \quad (3.3.128)$$

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

$$\begin{aligned} [\hat{\ell}_j, \hat{\vec{\ell}}^2] &= [\hat{\ell}_j, \sum_{k=1}^3 \hat{\ell}_k^2] = \\ &= -i\hbar \sum_{k,l=1}^3 \epsilon_{k,j,l} (\hat{\ell}_k \hat{\ell}_l + \hat{\ell}_l \hat{\ell}_k) = -i\hbar \sum_{k,l=1}^3 \epsilon_{k,j,l} (\hat{\ell}_k \hat{\ell}_l - \hat{\ell}_l \hat{\ell}_k) = 0. \end{aligned} \quad (3.3.129)$$

Ezzel beláttuk, amit akartunk.

Ha a vizsgált, egyetlen pontrészcskéből álló rendszer forgásszimmetrikus, akkor a Hamilton-operátor az impulzusmomentum négyzetének operátorával is felcserélhető. Ez nyilvánvaló, hiszen felcserélhető a pályaimpulzusmomentum bármelyik Descartes-komponensének operátorával, úgyhogy akkor az azok kifejezéseiként megalkotott impulzusmomentum négyzetének operátorával is felcserélhető.

A pályaimpulzusmomentum léptető operátorai

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

$$\hat{\ell}_{\pm} = \hat{\ell}_x \pm i\hat{\ell}_y. \quad (3.3.130)$$

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

$$\hat{\ell}_{\pm}^{\dagger} = \hat{\ell}_{\mp}. \quad (3.3.131)$$

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

$$[\hat{\ell}_+, \hat{\ell}_-] = 2\hbar\hat{\ell}_z, \quad [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_+] = \hbar\hat{\ell}_+, \quad [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_-] = -\hbar\hat{\ell}_-, \quad (3.3.132)$$

Ugyancsak egyszerű azonosság a következő:

$$\hat{\vec{\ell}}^2 = \hat{\ell}_+ \hat{\ell}_- + \hat{\ell}_z^2 - \hbar \hat{\ell}_z = \hat{\ell}_- \hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_z^2 + \hbar \hat{\ell}_z. \quad (3.3.133)$$

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

$$[\hat{\vec{\ell}}^2, \hat{\ell}_\pm] = 0. \quad (3.3.134)$$

A pályaimpulzusmomentum operátora gömbi polárkoordináta-rendszerben

Ha bevezetjük a részecske helyzetének jellemzésére a gömbi polárkoordinátákat a szokásos

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta, \quad (3.3.135)$$

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:

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ \hat{\ell}_\pm &= \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \end{aligned} \quad (3.3.136)$$

Az impulzusmomentum négyzetének operátorára ekkor

$$\hat{\vec{\ell}}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \equiv -\hbar^2 \Delta_{\theta, \varphi} \quad (3.3.137)$$

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-operátor szögfüggő része:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \hat{\vec{\ell}}^2. \quad (3.3.138)$$

A pályaimpulzusmomentum sajátfüggvényei és sajátértékei

A fentiekben kiderült, hogy a pályaimpulzusmomentum komponenseinek operátorai nem felcserélhetők egymással,

$$[\hat{\ell}_j, \hat{\ell}_k] = i\hbar \epsilon_{j,k,l} \hat{\ell}_l, \quad (3.3.139)$$

de bármelyikük felcserélhető a pályaimpulzusmomentum négyzetének operátorával,

$$[\hat{\ell}_j, \hat{\vec{\ell}}^2] = 0. \quad (3.3.140)$$

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 $\hat{\vec{\ell}}^2$ operátorok egyidejűleg mérhetőek, mivel ezek egymással felcserélhetőek. 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:

$$-i\hbar\partial_\varphi f(r, \theta, \varphi) = \ell_z f(r, \theta, \varphi), \quad (3.3.141)$$

$$-\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}f(r, \theta, \varphi) = C f(r, \theta, \varphi), \quad (3.3.142)$$

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 (3.3.141) egyenlet

$$-i\hbar\partial_\varphi Y(\theta, \varphi) = \ell_z Y(\theta, \varphi) \quad (3.3.143)$$

alakot ölt. Keressük ennek megoldását szeparált,

$$Y(\theta, \varphi) = \Phi(\varphi)\Theta(\theta) \quad (3.3.144)$$

alakban. A φ -függő részre a

$$-i\hbar\frac{d}{d\varphi}\Phi(\varphi) = \ell_z\Phi(\varphi) \quad (3.3.145)$$

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

$$\Phi(\varphi) = e^{\frac{i}{\hbar}\ell_z\varphi}. \quad (3.3.146)$$

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 transzformálódik²². Ezért a $\Phi(\varphi)$ hullámfüggvénynek 2π szerint periodikusnak kell lennie, egyébként nem lenne egyértékű. Az egyértékűség feltétele, hogy

$$\ell_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.3.147)$$

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:**

$$\Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}. \quad (3.3.148)$$

²²Valójában 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 szorozhatnak 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.

Mielőtt tovább megyünk, 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 $\hat{\ell}^2$ -nek, azaz amelyre

$$\hat{\ell}_z|C, m\rangle = \hbar m|C, m\rangle, \quad \hat{\ell}^2|C, m\rangle = C|C, m\rangle, \quad (3.3.149)$$

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:

$$\hat{\ell}_z(\hat{\ell}_\pm|C, m\rangle) = \hbar(m\pm 1)\hat{\ell}_\pm|C, m\rangle, \quad \hat{\ell}^2(\hat{\ell}_\pm|C, m\rangle) = C\hat{\ell}_\pm|C, m\rangle. \quad (3.3.150)$$

Ezért nevezzük ezeket az operátorokat léptető operátoroknak, merthogy ± 1 -gyel léptetik a pályaimpulzusmomentum z -irányú vetületének a sajátértékét. Kérdés, hogy ez a léptetés a végtelenségig folytatható-e, vagy nem.

Vegyünk most a tetszőleges $m = \ell > 0$ 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 (3.3.142) sajátértékegyenletet is kielégíti és amelyről nem lehet az impulzusmomentum vetületének sajátértékét felfelé léptetni. Keressük ezért a

$$\hat{\ell}_+|\phi_+\rangle = 0, \quad (3.3.151)$$

azaz az

$$\hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) f(\theta) e^{i\ell\varphi} = 0 \quad (3.3.152)$$

egyenlet megoldását. A φ szerinti deriválást elvégezve kapjuk, hogy

$$\frac{df(\theta)}{d\theta} = \ell \operatorname{ctg} \theta, \quad (3.3.153)$$

ahonnan, normálási tényezőtől eltekintve:

$$f(\theta) = \sin^\ell \theta. \quad (3.3.154)$$

Azt is könnyű belátni, hogy a kapott

$$\phi_+(\theta, \varphi) \propto e^{i\ell\varphi} \sin^\ell \theta \quad (3.3.155)$$

hullámfüggvény az impulzusmomentum négyzetének is sajátfüggvénye:

$$\hat{\ell}^2|\phi_+\rangle = (\hat{\ell}_- \hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_z^2 + \hbar \hat{\ell}_z)|\phi_+\rangle = \hbar^2 \ell(\ell + 1)|\phi_+\rangle, \quad (3.3.156)$$

mégpedig a

$$C = \hbar^2 \ell(\ell + 1) \quad (3.3.157)$$

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 $|\phi_+\rangle$, maximális $m = \ell$ értékhez tartozó állapotból kiindulva az $\hat{\ell}^2$ és az $\hat{\ell}_z$ operátorok közös sajátfüggvényeit mind elő tudjuk állítani, ha rendre hattatjuk a lefelé léptető $\hat{\ell}_-$ operátort. Vezessük be a szokásosabb jelölést, hogy a megfelelő sajátvektorokat az ℓ és m értékével jelöljük. Ekkor $|\phi_+\rangle = |\ell, \ell\rangle$ és

$$\begin{aligned}\hat{\ell}_+|\ell, \ell\rangle &= 0, & \hat{\ell}_z|\ell, \ell\rangle &= \hbar\ell|\ell, \ell\rangle, \\ \hat{\ell}_-|\ell, \ell\rangle &\propto |\ell, \ell-1\rangle, & \hat{\ell}_z|\ell, \ell-1\rangle &= \hbar(\ell-1)|\ell, \ell-1\rangle, \\ &\vdots \\ (\hat{\ell}_-)^{2\ell}|\ell, \ell\rangle &\propto |\ell, -\ell\rangle, & \hat{\ell}_z|\ell, -\ell\rangle &= -\hbar\ell|\ell, -\ell\rangle.\end{aligned}\quad (3.3.158)$$

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

Valóban, a maximális m értékhez tartozó sajátfüggvényre fennálló

$$\hat{\ell}_+\phi_+(\theta, \varphi) = 0 \quad (3.3.159)$$

koordináta-reprezentációban felírt egyenlet komplex konjugáltja

$$0 = [\hat{\ell}_+\phi_+(\theta, \varphi)]^* = \hat{\ell}_+\phi_+^*(\theta, \varphi) = \hat{\ell}_-\phi_+^*(\theta, \varphi). \quad (3.3.160)$$

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,

$$\begin{aligned}\hat{\ell}_z\phi_+^*(\theta, \varphi) &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \phi_+^*(\theta, \varphi) = -\hbar\ell\phi_+^*(\theta, \varphi), \\ \hat{\ell}^2\phi_+^*(\theta, \varphi) &= [\hat{\ell}_+\hat{\ell}_- + \hat{\ell}_z^2 - \hbar\hat{\ell}_z]\phi_+^*(\theta, \varphi) = \hbar^2\ell(\ell+1)\phi_+^*(\theta, \varphi),\end{aligned}\quad (3.3.161)$$

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

$$\hat{\ell}_-|\ell, -\ell\rangle = 0. \quad (3.3.162)$$

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 $\hbar m = -\hbar\ell, -\hbar(\ell-1), \dots, \hbar(\ell-1), \hbar\ell$ sajátértékei tartoznak. A megfelelő, 1-re normált sajátállapotok,

$$\langle \theta, \varphi | \ell, m \rangle = Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) \quad (3.3.163)$$

a gömbfelületi függvények, a keresett sajátfüggvények.

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

$$\begin{aligned}\hat{\ell}_z Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) &= m\hbar Y_{\ell, m}(\theta, \varphi), \\ \hat{\ell}^2 Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) &= \hbar^2\ell(\ell+1) Y_{\ell, m}(\theta, \varphi)\end{aligned}\quad (3.3.164)$$

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

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta Y_{\ell',m'}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = \delta_{\ell,\ell'} \delta_{m,m'}. \quad (3.3.165)$$

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 $\hat{\ell}^2, \hat{\ell}_z$ operátorok sajátfüggvényeire az alábbiak szerint hatnak:

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_+ |\ell, m\rangle & \begin{cases} \propto |\ell, m+1\rangle, & \text{ha } m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1 \\ = 0, & \text{ha } m = \ell \end{cases}, \\ \hat{\ell}_- |\ell, m\rangle & \begin{cases} \propto |\ell, m-1\rangle, & \text{ha } m = -\ell+1, \dots, \ell \\ = 0, & \text{ha } m = -\ell \end{cases} \end{aligned} \quad (3.3.166)$$

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

Pontrészecske pályaimpulzusmomentuma és forgásszimmetria

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

$$[\hat{\ell}_j, \hat{H}] = 0. \quad (3.3.167)$$

Ekkor a pontrészecske \hat{H} Hamilton-operátorának, a pályaimpulzusmomentuma z -irányú vetülete $\hat{\ell}_z$ operátorának és a pályaimpulzusmomentum négyzete $\hat{\ell}^2$ 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-részecskes 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. Másrészt 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 egymástól²³. Azt**

²³Általánosságban (a Hamilton-operátor konkrét 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.

mondjuk, hogy a forgási szimmetria azt eredményezi, hogy az egyes energiaszintekhez állapot-multiplettek tartoznak. Arról, hogy a Természetben csakúgyan 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-féle megvalósulásának.

Sokrészecskés rendszer eredő pályaimpulzusmomentuma.

Ha megvizsgálánk, hogy mi az az operátor, amely egy N -részecskés rendszer²⁴ hullámfüggvényének megváltozását generálja a koordináta-rendszer infinitezimális, térbeli elforgatása során, akkor azt kapjuk, hogy ez az operátor az egyes részecskék pályaimpulzusmomentum-operátorainak vektori összegzésével kapott operátor. Ezért az N -részecskés rendszer eredő $\hat{\vec{L}}$ pályaimpulzusmomentumának az operátorát úgy kapjuk meg, hogy vektorilag összegezzük az egyes részecskék $\hat{\vec{\ell}}_a$ pályaimpulzusmomentumának operátorait:

$$\hat{\vec{L}} = \sum_{a=1}^N \hat{\vec{\ell}}_a. \quad (3.3.168)$$

Az egyes pályaimpulzusmomentum-komponensek operátorai a

$$[\hat{\ell}_{a,j}, \hat{\ell}_{b,k}] = i\hbar\delta_{a,b}\epsilon_{j,k,l}\hat{\ell}_{a,l} \quad (3.3.169)$$

csererelációknak tesznek eleget, ugyanis bármely két, különböző részecskékhez tartozó pályaimpulzusmomentum-komponens operátora kommutál, hiszen egyik az egyik, a másik a másik részecske állapotainak terében hat. Ezeknek a csererelációknak a segítségével könnyű belátni, hogy az eredő pályaimpulzusmomentum komponensei ugyanolyan alakú csererelációknak tesznek eleget, mint egy részecske pályaimpulzusmomentumának komponensei:

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar\epsilon_{j,k,l}\hat{L}_l. \quad (3.3.170)$$

Arról is meggyőződhetünk, hogy az eredő pályaimpulzusmomentum négyzetének operátorával valamennyi Descartes-komponensének operátora felcserélhető:

$$[\hat{L}_j, \hat{\vec{L}}^2] = 0. \quad (3.3.171)$$

A megfelelő operátorok koordináta-reprezentációban ugyanolyan alakúak, mint a pont-részecskére 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. Ezek szerint az N -részecskés rendszer állapotai az eredő pályaimpulzusmomentum négyzetének $\hbar^2 L(L+1)$ sajátértékeivel és az eredő pályaimpulzusmomentum \hat{L}_z tetszőlegesen felvett z -tengely irányába eső \hat{L}_z vetületének $M\hbar$ sajátértékeivel jellemezhetők, ahol $L = 0, 1, 2, \dots$ lehet és bármely L kvantumszámhoz tartozó

²⁴Ismét zérus spinű részecskékből álló rendszerről van szó.

állapotok altere $(2L+1)$ dimenziós, amelyben az $M = -L, -L+1, \dots, 0, \dots, L-1, L$ vetülethaz tartozó állapotok egy ortonormált bázist alkotnak.

Ezek az állapotok azonban csak akkor állnak mind rendelkezésre, ha az egyes részecskék pályaimpulzusmomentumai tetszőlegesen lehetnek. 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?

Az impulzusmomentumok összeadása

A megfelelő alter megkeresését 2 részecske, azaz 2 impulzusmomentum összeadásának példáján mutatjuk be, bizonyítás nélkül. **Legyen az egyik részecske ℓ_1 -hez tartozó állapotok $|\ell_1 m_1\rangle$ valamelyikében, a másik részecske az ℓ_2 -höz tartozó $|\ell_2 m_2\rangle$ állapotok valamelyikében. A 2-részecskés rendszer eredő pályaimpulzusmomentumának lehetséges értékei ekkor:**

$$L \in [-|\ell_1 - \ell_2|, -|\ell_1 - \ell_2| + 1, \dots, 0, \dots, \ell_1 + \ell_2 - 1, \ell_1 + \ell_2], \quad (3.3.172)$$

és minden L -hez tartozó alter $(2L+1)$ -szeresen elfajult, azaz a lehetséges M értékek:

$$M \in [-L, -L+1, \dots, 0, \dots, L-1, L] \quad (3.3.173)$$

Vegyük észre, hogy ez pontosan

$$\sum_{L= -|\ell_1 - \ell_2|}^{\ell_1 + \ell_2} (2L+1) = (2\ell_1+1)(2\ell_2+1) \quad (3.3.174)$$

darab állapot, amelyek értelmezésüknél fogva páronként ortogonálisak. Ez pontosan ugyanannyi állapot, mint ahány állapotot úgy kapunk, hogy az egyik részecskét az $|\ell_1 m_1\rangle$ ($m_1 \in [-\ell_1, -\ell_1+1, \dots, \ell_1-1, \ell_1]$) állapotok valamelyikébe, a másikat a $|\ell_2 m_2\rangle$ ($m_2 \in [-\ell_2, -\ell_2+1, \dots, \ell_2-1, \ell_2]$) állapotok valamelyikébe helyezzük. 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.** Akkor létezik olyan bázistranszformáció, amelyik az egyik bázist átviszi a másikba:

$$|LM; \ell_1 \ell_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} (LM | \ell_1 m_1 \ell_2 m_2) | \ell_1 m_1 \rangle \otimes | \ell_2 m_2 \rangle, \quad (3.3.175)$$

ahol a bázistranszformáció mátrixának elemei az ún. $(LM | \ell_1 m_1 \ell_2 m_2)$ Clebsch-Gordan-együtthatók. Értéküket a csoportelmélet módszereivel meghatározták, ill. algoritmust adtak meg a kiszámolásukra.

3.3.5 A spin

A teljes impulzusmomentum

A tapasztalat szerint a fizikai rendszerek akkor is rendelkezhetnek valamely inerciarendszerben impulzusmomentummal, ha abban nyugalomban vannak. Az inerciarendszerben nyugvó fizikai rendszer impulzusmomentumát **sajátimpulzusmomentumnak, spinnek nevezzük**, mert ez nyilvánvalóan nem a rendszernek, mint egésznek a haladó mozgásából származó pályaimpulzusmomentum. **A tapasztalat azt mutatja, hogy vannak részecskék, amelyek nem rendelkeznek (legalábbis jelenlegi ismereteink szerint) belső szerkezettel, mégis van nekik nem zérus spinjük.** Ilyenek pl. az elektron, a kvarkok, stb. Általában a részecskékből felépülő fizikai rendszerek spinje részben az egyes részecskék saját impulzusmomentumából, részben pedig a rendszeren belüli mozgásukból származó pályaimpulzusmomentumukból tevődik össze. Ha a fizikai rendszer még haladó mozgást is végez, akkor a spinjéhez még a tömegközéppontjának a pályamozgásából adódó pályaimpulzusmomentuma is hozzáadódik. **Általában amikor arra akarunk utalni, hogy az eredő impulzusmomentum pályamozgásból és a rendszert felépítő részecskék saját impulzusmomentumából tevődik össze, akkor szokás a rendszer teljes impulzusmomentumáról beszélni.**

A mérőeszközaink felbontóképességétől is függhet, hogy a teljes impulzusmomentum mennyiben pályaimpulzusmomentum, mennyiben spin és, hogy a spint mennyiben tudjuk pályamozgással magyarázni. Ezért azt várjuk, hogy a következő kvantummechanikai leírásban **az impulzusmomentum operátorainak matematikai tulajdonságai függetlenek lesznek az impulzusmomentum fizikai eredetétől**, azaz hogy az impulzusmomentum Descartes-komponenseinek az operátorai mindig ugyanazokat a csererelációkat elégitik ki.

A pályaimpulzusmomentum példáján azt láttuk, hogy az impulzusmomentum operátorai a térbeli elforgatásokkal vannak kapcsolatban: az infinitezimális térbeli elforgatások generátorai olyan esetben, amikor a részecskék nem rendelkeznek saját impulzusmomentummal. Ennek köszönhetően ilyenkor a teljes (pálya)impulzusmomentum az a fizikai mennyiség, amely forgásszimmetrikus rendszer esetén megmarad. **A \vec{J} teljes impulzusmomentum általános definícióját a kvantummechanikában ezért úgy adjuk meg, hogy az az a fizikai mennyiség, amely forgásszimmetrikus rendszerben megmarad. Ezért a teljes impulzusmomentum Descartes-komponenseinek $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ operátorait rendre azonosítjuk azokkal az operátorokkal, amelyek a rendszer $|\Psi\rangle$ állapotvektorának**

$$|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi\rangle - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_j \delta\alpha_j |\Psi\rangle \quad (3.3.176)$$

transzformációit generálják az $x-$, $y-$, ill. $z-$ tengely körüli infinitezimális $\delta\alpha_x$, $\delta\alpha_y$, ill. $\delta\alpha_z$ szögű elforgatások során.

Ha a rendszer forgásszimmetrikus, akkor a rendszer \hat{H} Hamilton-operátora fel kell, hogy cserélhető legyen az infinitezimális elforgatásokat generáló operátorokkal²⁵,

$$[\hat{J}_i, \hat{H}] = 0, \quad (3.3.181)$$

²⁵A forgásszimmetrikus rendszer elforgatása során nem változhat a Hamilton-operátor tetszőleges $\langle\Psi|\hat{H}|\Psi'\rangle$ mátrixeleme, ami azt jelenti, hogy

$$\langle\Psi|\left(1 + \frac{i}{\hbar} \delta\alpha_j \hat{J}_j^\dagger\right) \hat{H} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_j^\dagger \delta\alpha_j\right) |\Psi'\rangle - \langle\Psi|\hat{H}|\Psi'\rangle = \mathcal{O}(\delta^2\alpha_j), \quad (3.3.177)$$

ami viszont tényleg azt jelenti, hogy

$$\dot{\hat{J}}_i = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{J}_i] = 0, \quad (3.3.182)$$

azaz, hogy ezek az operátorok megmaradók, azaz bármely állapotban a várható értékük független az időtől.

Melyek a teljes impulzusmomentum operátorainak, azaz az infinitezimális, térbeli elforgatásokat generáló operátoroknak a csererelációi. Ezt könnyen kitalálhatjuk, ha arra gondolunk, hogy a teljes impulzusmomentum származhat tisztán csak pályaimpulzusmomentumból. Tudjuk, hogy ekkor **a csererelációk**

$$[\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i\hbar \sum_{l=1,2,3} \epsilon_{j,k,l} \hat{J}_l, \quad [\hat{J}_j, \hat{\vec{J}}^2] = 0, \quad (3.3.183)$$

ahol a teljes impulzusmomentum négyzetének az operátora

$$\hat{\vec{J}}^2 = \sum_{j=1,2,3} \hat{J}_j^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2. \quad (3.3.184)$$

A teljes impulzusmomentum fizikai eredetétől függetlenül mindig ezek a csererelációk teljesülnek a teljes impulzusmomentum operátoraira²⁶.

Annak eldöntésében, hogy melyek a teljes impulzusmomentum lehetséges sajátállapotai és sajátvektorai, a matematika, nevezetesen a csoportelmélet jön a segítségünkre. Ez azt mondja, hogy a fenti típusú csererelációk mindig azt eredményezik, hogy **a $\hat{\vec{J}}^2$ és a \hat{J}_z operátoroknak van közös $|JM\rangle$ állapotokból álló sajátfüggvényrendszere:**

$$\hat{\vec{J}}^2 |JM\rangle = \hbar^2 J(J+1) |JM\rangle, \quad \hat{J}_z |JM\rangle = \hbar M |JM\rangle, \quad (3.3.185)$$

ahol $J = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$ lehet és bármely adott J esetén $M = -J, -J+1, \dots, J-1, J$ értékeket vesz fel, azaz a J teljes impulzusmomentumú állapotok altere $2J+1$ -dimenziós.

ahonnan

$$\hat{J}_j^\dagger \hat{H} - \hat{H} \hat{J}_j = 0 \quad (3.3.178)$$

adódik. Másrészt az elforgatás során nem változhat a skaláris szorzat, azaz

$$\langle \Psi | \left(1 + \frac{i}{\hbar} \delta\alpha_j \hat{J}_j^\dagger \right) \left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_j^\dagger \delta\alpha_j \right) | \Psi' \rangle - \langle \Psi | \Psi' \rangle = \mathcal{O}(\delta^2 \alpha_j), \quad (3.3.179)$$

kell teljesüljön tetszőleges $|\Psi\rangle$ és $|\Psi'\rangle$ állapotok esetén. Innen azt kapjuk, hogy \hat{J}_j önadjungált operátorok,

$$\hat{J}_j^\dagger = \hat{J}_j. \quad (3.3.180)$$

Ezért akkor valóban $[\hat{J}_j, \hat{H}] = 0$, másrészt a \hat{J}_j operátorok önadjungáltak, így valóságosak a sajátértékeik, tehát lehetnek fizikai mennyiségnek, az impulzusmomentumnak az operátorai.

²⁶Annak szigorú, matematikai bizonyítása, hogy az infinitezimális, térbeli elforgatásokat generáló operátorok ilyen csererelációkat elégítenek ki, meghaladja ezen kurzus lehetőségeit.

Az elektron spinje

Mielőtt tovább halad, olvassa el a függelék A.1.4 részét!

A tapasztalat azt mutatja, hogy vannak olyan fizikai objektumok, mint pl. az elektron, a müon, a tau-részecske és a kvarkok, amelyeknek vagy nincsen belső szerkezetük, vagy a jelenlegi berendezéseinkkel és kísérleti eljárásainkkal nem tudjuk azt érzékelni, mégis rendelkeznek impulzusmomentummal, nem zérus spinnel. Az elektron spinjének létezéséről úgy győződhetünk meg, hogy elektronágyúban, azonos módon előállított, azonos impulzusú elektronokat lövünk át egy keskeny térrészen, amelyben az elektronok haladási irányára merőleges z irányban erősen változó, inhomogén mágneses tér $B_z(z)$ uralkodik, $\frac{dB_z}{dz} \neq 0$. Ekkor azt vesszük észre, hogy az adott vastagságú, inhomogén mágneses teret tartalmazó térrészen áthaladó elektronnyaláb ketté válik: az elektronok egy része pozitív, másik része ugyanolyan mértékű negatív z -irányú eltérülést szenved. Ez azt kell jelentse, hogy az egyébként minden szempontból azonosnak tekinthető elektronok mégis két különböző állapotban kell legyenek. A klasszikus fizikában megtanultuk, hogy mágneses dipólmomentummal rendelkező részecskékre inhomogén mágneses térben olyan F_z erő hat, amely arányos a mágneses momentum z irányú m_z vetületével és a mágneses indukció ilyen irányú változásával: $F_z \propto m_z \frac{dB_z}{dz}$. Ha itt megfordítjuk a mágneses momentum irányát, akkor az erő és az általa okozott eltérülés is ellentétesre fordul. A leírt kísérletből, amelyet Stern és Gerlach végeztek el, arra lehetett következtetni, hogy

1. az elektronnak van a helyzetvektorán kívül egy további szabadsági foka, a mágneses momentuma,
2. az elektron mágneses momentumának vetülete a z -tengelyre, amelyet a kísérletben a mágneses indukció iránya jelöl ki, csak kétféle értéket, $m_z = \pm\mu$ vehet fel.

Az elektron mágneses momentuma tehát nem úgy viselkedik, mint egy μ nagyságú klasszikus mágneses momentum, amelynek vektora a z -tengellyel tetszőleges szöget bezárhat, és amelynek a z -irányú vetülete így a $[-\mu, +\mu]$ véges intervallumban bármilyen értéket felvehet.

A klasszikus elektrodinamika keretében azt is belátták, hogy pályamozgást végző, azonos, töltött részecskék rendszerének pályaimpulzusmomentuma és mágneses momentuma arányosak egymással. Logikusnak tűnik feltenni a kérdést, nem áll-e az elektron mágneses momentuma mögött is valamilyen impulzusmomentum. Az Einstein és de Haas által elvégzett kísérletben sikerült bizonyítani egy hasonló kapcsolatot nevezetesen,

1. hogy az elektron mágneses momentumának kapcsolatban kell állnia valamilyen, az elektron által hordozott impulzusmomentummal;
2. és hogy ez a kapcsolat lineáris;
3. sőt hogy az arányossági tényező különbözik a pályaimpulzusmomentum és a mágneses momentum közötti, a klasszikus elektrodinamikából ismert arányossági tényezőtől.

A fentiek alapján tehát 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 nyugalmi rendszerében az elektron spinje egyúttal az elektron teljes impulzusmomentuma is, úgyhogy hogy az elektron spinoperátorának Descartes-komponensei ki kell elégítsék az

$$[\hat{s}_j, \hat{s}_k] = i\hbar\epsilon_{j,k,l}\hat{s}_l, \quad [\hat{s}_j, \hat{s}^2] = 0 \quad (3.3.186)$$

csererelációkat. Matematikai szempontból most már az a kérdés, hogy van-e ezeknek az operátoroknak olyan ábrázolása, amely a 2-dimenziós állapottéren, 2×2 -es mátrixok alakjában valósul meg. Az elektronnól ugyanis a fenti tapasztalat alapján tudjuk, hogy ha a térbeli mozgásától eltekintünk, akkor csak kétféle állapota lehetséges. **Az elektron spin-szabadsági fokához tartozó állapotok tere tehát két-dimenziós kell legyen.** Mondjuk az a 2 állapot, amikor az elektron spinje a z -tengely irányába mutat, ill. amikor azzal ellentétes, a 2 bázisállapot. Szimbolikusan jelölhetjük ezeket az

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.3.187)$$

oszlopvektorokkal. Az állapottér pedig az összes

$$c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (3.3.188)$$

alakú oszlopvektorokkal ábrázolt vektorok tere, ahol c_1 és c_2 tetszőleges komplex számok.

A teljes impulzusmomentumnak van olyan értéke, amikor az állapotok $2J + 1 = 2$ -dimenziós teret feszítenek ki, ezért ez az eset alkalmazható az elektron spinjének a leírására. Abból tehát, hogy **az elektron spinállapotainak tere 2-dimenziós**, következik, hogy $2s + 1 = 2$, **ami $s = \frac{1}{2}$ spinnek felel meg.** Ezért azt mondjuk, hogy az elektron spinje $s = \frac{1}{2}$. A felírt 2 bázisállapotot megfeleltethetjük akkor az

$$|s = \frac{1}{2}, m = \frac{1}{2}\rangle \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |s = \frac{1}{2}, m = -\frac{1}{2}\rangle \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.3.189)$$

módon a spin négyzete és a spin harmadik komponense közös sajátvektorainak. Ekkor **a spinoperátorok csererelációi kielégíthetők a**

$$\hat{s}_j = \frac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}_j \quad (3.3.190)$$

operátorokkal, ahol $\hat{\sigma}_j$ az úgynevezett **Pauli-mátrixok:**

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.3.191)$$

4 EGYSZERŰ FIZIKAI RENDSZEREK

4.1 Spin külső mágneses térben

Először a legegyszerűbb 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.

4.1.1 Szabad spin

Tegyük fel, hogy semmilyen mágneses tér nem hat az elektron spinjére. Az ilyen rendszer a térben teljesen forgásszimmetrikus. A Hamilton-operátornak felcserélhetőnek kell lennie \hat{s}^2 -tel és a spin bármely \hat{s}_j ($j = 1, 2, 3$) Descartes-komponensével. Ezért úgy vehetjük, hogy az elektron spinjének a Hamilton-operátora egység-operátora arányos \hat{s}^2 operátorral, és a spinállapot stacionárius Schrödinger-egyenlete

$$a\hat{s}^2|\chi\rangle = E|\chi\rangle. \quad (4.1.1)$$

Mivel

$$\hat{s}^2 = \frac{1}{4}\hbar^2\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{4}\hbar^2\sum_{j=1}^3\hat{\sigma}_j^2 = \frac{1}{4}\hbar^2\sum_{j=1}^3\hat{1} = \frac{3}{4}\hbar^2\hat{1}, \quad (4.1.2)$$

a stacionárius állapot egyenletét

$$\frac{3a}{4}\hbar^2\hat{1}|\chi\rangle = E|\chi\rangle \quad (4.1.3)$$

alakban minden spinállapot ugyanazzal az $E = \frac{3a}{4}\hbar^2$ energiával elégíti ki. A szabad spin tetszőlegesen állhat. Mivel az állapottér 2-dimenziós, 2 lineárisan független állapot létezik, amelyek egyszerre sajátállapota a spin négyzetének és mondjuk a spin, egy tetszőleges z -tengelyre vett \hat{s}_z vetületének, ezek a $|m_s = \pm\frac{1}{2}\rangle$ állapotok:

$$\begin{aligned} \hat{s}^2|m_s\rangle &= \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right)\hbar^2|m_s\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|m_s\rangle, \\ \hat{s}_z|m_s\rangle &= m_s|m_s\rangle, \end{aligned} \quad (4.1.4)$$

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 továbbiakban jelöljük a spin z -irányú vetületének sajátvektorait egyszerűen csak $|\pm\rangle$ alakban, elhagyva a nyilvánvaló $\frac{1}{2}$ -et. Ha a spin-ábrázolásban keressük a $|\chi\rangle$ spinállapotú 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 hullámfüggvények felelnek meg. Ezeket szokás

$$\chi_\sigma^{[+]} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_\sigma^{[-]} \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.1.5)$$

oszlopvektorok alakjában is ábrázolni, ahol a felső ill. az alsó „sor” felel meg rendre a független változó $\sigma = +\frac{1}{2}$ ill. $\sigma = -\frac{1}{2}$ értékeinek.

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. A spin a tőle a tapasztalat szerint elválaszthatatlanul hozzá tartozó mágneses momentumnál fogva kölcsön hat a külső, \vec{B} mágneses indukciójú térrel. A klasszikus elektrodinamika szerint a kölcsönhatás potenciális energiája $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$. Ennek megfelelően a kvantummechanikában a külső mágneses térbe helyezett elektron Hamilton-operátora:

$$\hat{H} = a\hat{s}^2 - (-g_s)\hat{s} \cdot \vec{B} \quad (4.1.6)$$

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

$$\hat{H} = a\hat{s}^2 + g_s\hat{s}_z B_z \quad (4.1.7)$$

adódik. A stacionárius állapotokra vonatkozó Schrödinger-egyenlet:

$$\begin{aligned} \left[a\hat{s}^2 + g_s\hat{s}_z B_z \right] |\chi\rangle &= E|\chi\rangle, \\ \left[\frac{3a}{4}\hbar^2\hat{1} + \frac{1}{2}g_s B_z \hbar\hat{\sigma}_z \right] |\chi\rangle &= E|\chi\rangle. \end{aligned} \quad (4.1.8)$$

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

$$(H) = \begin{pmatrix} \langle \frac{1}{2} | \hat{H} | \frac{1}{2} \rangle & \langle \frac{1}{2} | \hat{H} | -\frac{1}{2} \rangle \\ \langle -\frac{1}{2} | \hat{H} | \frac{1}{2} \rangle & \langle -\frac{1}{2} | \hat{H} | -\frac{1}{2} \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3a}{4}\hbar^2 + \frac{1}{2}g_s B_z \hbar & 0 \\ 0 & \frac{3a}{4}\hbar^2 - \frac{1}{2}g_s B_z \hbar \end{pmatrix}, \quad (4.1.9)$$

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

$$0 = \det \begin{pmatrix} \frac{3a}{4}\hbar^2 + \frac{1}{2}g_s B_z \hbar - E & 0 \\ 0 & \frac{3a}{4}\hbar^2 - \frac{1}{2}g_s B_z \hbar - E \end{pmatrix} = \left(\frac{3a}{4}\hbar^2 + \frac{1}{2}g_s B_z \hbar - E \right) \left(\frac{3a}{4}\hbar^2 - \frac{1}{2}g_s B_z \hbar - E \right) \quad (4.1.10)$$

másodfokú²⁷ egyenletre vezet. Az energia-sajátértékek:

$$E_\pm = \frac{3a}{4}\hbar^2 \pm \frac{1}{2}g_s B_z \hbar. \quad (4.1.11)$$

²⁷Az állapotok tere 2-dimenziós, ezért 2×2 -es mátrix determinánsának eltűnését kell megkövetelni.

Az eredetileg 2-szeresen degenerált energiaszint **felhasadt** a külső mágneses tér hatására 2, különböző energiaszintre, amelyek távolsága

$$\Delta E = g_s B_z \hbar. \quad (4.1.12)$$

Energetikailag az a kedvezőbb, a mélyebben fekvő állapot, ha az elektron spinje beáll a mágneses térrel ellentétes irányba (azaz a mágneses momentum beáll a mágneses indukcióval egyező irányba).

Az impulzusmomentum négyzetének adott sajátértékéhez tartozó elfajult energiaszint külső mágneses tér hatására bekövetkező felhasadását **Zeemann-effektusnak** 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 bekapcsoltuk a külső mágneses teret, akkor megsértettük explicit módon az elektron forgásszimmetriáját, a külső homogén mágneses tér jelenlétében már csak a z -tengely körüli elforgatásokkal szembeni szimmetria maradt meg. Szimmetria ilyen, explicit megsértésének a következménye, hogy az elfajult energiaszint felhasadt, hogy a multiplett, esetünkben a dublett „láthatóvá vált”, mint két különböző energiájú

állapot. A szimmetria megsérülésének további fontos következménye, hogy most már csak a külsőmágneses tér irányában „fel-” ill. „lefelé” mutató spinű két állapot marad energia-saját

állapot. 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 úgy is nézhetjük, hogy ha nem tudtuk volna, 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.

4.1.3 Spin T ideig ható, homogén mágneses térben

Vizsgáljuk most meg azt az esetet, hogy veszünk egy elektront, amely

$$|\chi_0\rangle = \cos \frac{\alpha}{2} |+\rangle + \sin \frac{\alpha}{2} |-\rangle \quad (4.1.13)$$

spinállapotban van. Kapcsoljuk be a $t = t_0$ pillanatban a z -tengely irányába mutató $B_z = |B| > 0$ homogén mágneses teret, majd T idő elteltével kérdezzük meg, hogy milyen állapotban van az elektron. Az elektron időtől függő $|\chi_T\rangle$ állapotvektorát az

$$\hat{U}(t_0 + T, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} T} \quad (4.1.14)$$

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

$$\begin{aligned}
|\chi_T\rangle &= \hat{U}(t_0 + T, t_0)|\chi_0\rangle \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}T}|\chi_0\rangle \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar}(a\hat{s}^2 + g_s\hat{s}_z B_z)T}|\chi_0\rangle \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{s}^2 + g_s\hat{s}_z B_z)T} \left(\cos\frac{\alpha}{2}|+\rangle + \sin\frac{\alpha}{2}|-\rangle \right) \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{3a\hbar^2}{4}T} \left(e^{-i\frac{1}{2}g_s B_z T} \cos\frac{\alpha}{2}|+\rangle + e^{+i\frac{1}{2}g_s B_z T} \sin\frac{\alpha}{2}|-\rangle \right)
\end{aligned} \tag{4.1.15}$$

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

$$\begin{aligned}
\langle\chi_0|\hat{s}_z|\chi_0\rangle &= \frac{1}{2}\hbar\langle\chi_0|\left(\cos\frac{\alpha}{2}|+\rangle - \sin\frac{\alpha}{2}|-\rangle\right) \\
&= \frac{1}{2}\hbar\left(\cos^2\frac{\alpha}{2} - \sin^2\frac{\alpha}{2}\right) = \frac{1}{2}\hbar\cos\alpha.
\end{aligned} \tag{4.1.16}$$

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:

$$\begin{aligned}
\langle\chi_T|\hat{s}_z|\chi_T\rangle &= \frac{1}{2}\hbar e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{3a\hbar^2}{4}T} \left\langle\chi_T\left| \left(e^{-i\frac{1}{2}g_s B_z T} \cos\frac{\alpha}{2}|+\rangle - e^{+i\frac{1}{2}g_s B_z T} \sin\frac{\alpha}{2}|-\rangle \right) \right. \right\rangle \\
&= \frac{1}{2}\hbar \left(e^{+i\frac{1}{2}g_s B_z T} \cos\frac{\alpha}{2}\langle+| + e^{-i\frac{1}{2}g_s B_z T} \sin\frac{\alpha}{2}\langle-| \right) \left(e^{-i\frac{1}{2}g_s B_z T} \cos\frac{\alpha}{2}|+\rangle - e^{+i\frac{1}{2}g_s B_z T} \sin\frac{\alpha}{2}|-\rangle \right) \\
&= \frac{1}{2}\hbar \left(\cos^2\frac{\alpha}{2} - \sin^2\frac{\alpha}{2} \right) \\
&= \frac{1}{2}\hbar\cos\alpha.
\end{aligned} \tag{4.1.17}$$

A spin „vektora” tehát várható értékben továbbra is α szöget zár be a z -tengellyel.

Számoljuk ki, hogy mi a spin x és y irányú vetületének várható értéke kezdetben és T idő múlva. Ehhez fel kell használjuk, hogy

$$\begin{aligned}
\hat{s}_x|+\rangle &= \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar|-\rangle, \\
\hat{s}_x|-\rangle &= \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar|+\rangle \\
\hat{s}_y|+\rangle &= \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar i \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar i|-\rangle, \\
\hat{s}_y|-\rangle &= \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\hbar i \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\hbar i|+\rangle
\end{aligned} \tag{4.1.18}$$

Ekkor

$$\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) \rangle \\
&= \frac{1}{2} \hbar \langle \chi_0 | \left(\cos \frac{\alpha}{2} |-\rangle + \sin \frac{\alpha}{2} |+\rangle \right) \rangle \\
&= \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) \rangle \\
&= \frac{1}{2} \hbar i \langle \chi_0 | \left(\cos \frac{\alpha}{2} |-\rangle - \sin \frac{\alpha}{2} |+\rangle \right) \rangle \\
&= \frac{1}{2} \hbar \left(\sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2} - \sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2} \right) = 0, \\
\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_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) \rangle \\
&= \frac{1}{2} \hbar \langle \chi_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) \rangle \\
&= \frac{1}{2} \hbar \left(e^{+ig_s B_z T} + e^{-ig_s B_z T} \right) \sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2} \\
&= \frac{1}{2} \hbar \cos(g_s B_z T) \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_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) \rangle \\
&= \frac{1}{2} \hbar i \langle \chi_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) \rangle \\
&= \frac{1}{2} \hbar i \left(-e^{+ig_s B_z T} + e^{-ig_s B_z T} \right) \sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2} \\
&= \frac{1}{2} \hbar \sin(g_s B_z T) \sin \alpha,
\end{aligned} \tag{4.1.19}$$

Ebből azt látjuk, hogy várható értékben a spin vektora a z -tengellyel ugyan állandó szöget zár be, de a z -tengelyre merőleges vetülete $\omega_P = g_s B_z$ állandó szögsebességgel forog. A spin a külső, homogén mágneses tér hatására ún. **Larmor-precessziót** végez.

A megfelelő klasszikus fizikai kép az, hogy a $\vec{\mu}$ mágneses momentummal rendelkező „pörgettyűre” a homogén külső mágneses tér $\vec{M} = \vec{\mu} \times \vec{B}$ forgatónyomatékokot 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:

$$\frac{d\vec{l}}{dt} = \vec{M}, \quad \Rightarrow \quad \frac{d\vec{l}}{dt} = -g\vec{l} \times \vec{B} \equiv -\vec{\omega} \times \vec{l}, \tag{4.1.20}$$

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, $l_z = \text{áll}$. A mozgásegyenletből adódik, hogy

$$\frac{d\vec{l}^2}{dt} = 2\vec{l} \cdot \frac{d\vec{l}}{dt} = -2\vec{l} \cdot (\vec{\omega} \times \vec{l}) = 0, \quad (4.1.21)$$

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.

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 irányára körül. A precesszió szögsebessége most is $g_s|B|$ nagyságú. Az elektron mágneses momentuma és spinje közötti arányossági tényező a tapasztalat szerint (az Einstein és de Haas kísérlete alapján) $g_s = \frac{e}{m_e c}$, 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.

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. Vonatkoztatási rendszernek inerciarendszert választunk, azaz olyan rendszert, amelyből nézve a tér homogén és izotróp, az idő pedig homogén. A fejezet végén megtanuljuk a hidrogén-atom legfontosabb tulajdonságait.

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:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}. \quad (4.2.1)$$

A kinetikus energia operátora, a klasszikus mechanikai analógia alapján

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad (4.2.2)$$

a potenciális energia operátora pedig a klasszikus mechanikai $V(\vec{r})$ potenciális energiából nyerhető, ha benne a helyzetvektort az operátorával helyettesítjük:

$$\hat{V} = V(\hat{\vec{r}}). \quad (4.2.3)$$

A belső szabadsági fokok nélküli részecske Hamilton-operátora tehát:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}). \quad (4.2.4)$$

Koordináta-reprezentációban ez az operátor

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \quad (4.2.5)$$

alakot ölt. Ennek megfelelően a pont részecskére vonatkozó Schrödinger-egyenlet pedig

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}, t) \quad (4.2.6)$$

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 folytonosan differenciálható hullámfüggvény.

Ha a pont részecske az x -tengely mentén egy-dimenziós mozgást végez, akkor a Schrödinger-egyenlet az alábbi alakra egyszerűsödik:

$$i\hbar\partial_t\psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)\right]\psi(x, t). \quad (4.2.7)$$

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 spin-állapotok \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

$$\frac{1}{2}\hat{\sigma}_z\chi_\sigma^{[\pm]} = \pm\frac{1}{2}\chi_\sigma^{[\pm]}. \quad (4.2.8)$$

Mivel az elektron hullámfüggvénye a σ diszkrét változónak is függvénye, ezért azt is mondhatjuk, hogy az elektron hullámfüggvényének 2 komponense van, amelyeket oszlopvektorban helyezhetünk el:

$$\Psi \equiv \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} = \Psi_+(\vec{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \Psi_-(\vec{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.2.9)$$

Az állapot normálási feltétele:

$$1 = \int d\vec{r} \sum_{\sigma=\pm\frac{1}{2}} |\Psi(\vec{r}, \sigma)|^2 = \int d\vec{r} \left(|\Psi_+(\vec{r})|^2 + |\Psi_-(\vec{r})|^2 \right). \quad (4.2.10)$$

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,

$$\hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \right] \otimes \hat{1}_s \quad (4.2.11)$$

a spinállapotok terén $\hat{1}_s$ egység-operátorként hat. Ilyenkor az elektron Schrödinger-egyenletének van szeparábilis megoldása, amely a (koordináta, spinvetület)-reprezentációban

$$\Psi_s(\vec{r}) = \psi(\vec{r})\chi_s \quad (4.2.12)$$

szorzat alakú hullámfüggvény. Ha kezdőfeltétel is ilyen, szorzat alakú hullámfüggvénnyel leírható állapot, akkor a Schrödinger-egyenlet megoldása során el is felejtkezhetünk a spinről, hiszen a spinállapot a mozgás során nem fog megváltozni, a térbeli hullámfüggvény pedig ugyanúgy fog az időben változni, mintha a részecskének nem is lenne spinje.

2. Ha az elektron térbeli mozgása elhanyagolható, vagy nem érdekes, a spinje azonban kölcsönhat homogén külső mágneses térrel, akkor az elektron Hamilton-operátora,

$$\hat{H} = \hat{1}_r \otimes \hat{H}_s [a\hat{s}^2 + eg\hat{s} \cdot \vec{B}] \quad (4.2.13)$$

a koordináta-hullámfüggvények \mathcal{H}_r terén hat $\hat{1}_r$ egységoperátorként. Itt $\hat{H}_s = a\hat{s}^2 + eg\hat{s} \cdot \vec{B}$ az előző fejezetben diszkutált Hamilton-operátor, ahol e az elektron

töltésének nagysága, és $-eg$ a spin és a mágneses momentum közötti arányossági tényező. Rendszerint az $a = 0$ választással szoktunk élni, azaz az 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. **Ha van az elektron spinje és térbeli mozgása között kapcsolat, akkor a Hamilton-operátornak van olyan tagja, azaz olyan kölcsönhatás, amely a koordináta-hullámfüggvények és a spin-hullámfüggvények terén egyaránt nem triviálisan (nem egységoperátorként) hat.** Az egyik ilyen példa, amikor a spin (ill. a vele kapcsolatos mágneses momentum) inhomogén mágneses térrel hat kölcsön:

$$\hat{H} = eg \sum_{j=1}^3 \hat{s}_j \otimes B_j(\vec{r}). \quad (4.2.14)$$

Egy másik példa a hely- és spin-jellegű szabadsági fokok összekapcsolódására az úgy nevezett **spin-pálya kölcsönhatás**. Az elektron pályamozgásából pályaimpulzusmomentum származik. A klasszikus fizikai kép azt sugallja, hogy az elektronnak mind a pályamozgásához, mind a spinjéhez tartozik mágneses momentum és azok mint mágneses dipólusok kölcsönhatnak egymással. Ez olyan kölcsönhatási Hamilton-operátort eredményez, amelynek alakja

$$\hat{H}_{s.p.} = -f(\vec{r}) \sum_{j=1}^3 \hat{\ell}_j \otimes \hat{S}_j, \quad (4.2.15)$$

amelyet röviden csak

$$\hat{H}_{s.p.} = -f(\vec{r}) \vec{\ell} \cdot \vec{S} \quad (4.2.16)$$

alakban szoktunk írni, ahol $f(\vec{r})$ csak a helyzetvektortól függő függvény. Ez az úgynevezett **spin-pálya kölcsönhatás**. Ennek következtében az atomi spektrumokban, a „spektrum-vonalakban” ún. **finom szerkezetet** lehet megfigyelni. Ha van spin-pálya kölcsönhatás, akkor az elektron Hamilton-operátora

$$\hat{H} = \hat{H}_r \otimes \hat{1}_S + \hat{H}_{s.p.} \quad (4.2.17)$$

4.2.3 A koordináta-hullámfüggvény valószínűségi jelentése

A Schrödinger-egyenlet alapján könnyen meggyőződhetünk a koordináta-hullámfüggvény valószínűségi jelentéséről: **a találati valószínűségekre kontinuitási egyenletet írhatunk fel.** Ehhez írjuk fel egymás után a hullámfüggvényre vonatkozó Schrödinger-egyenletet és annak komplex konjugáltját:

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi &= \hat{H}\psi, \\ -i\hbar\partial_t\psi^* &= \hat{H}^*\psi^*. \end{aligned} \quad (4.2.18)$$

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:

$$i\hbar \int_V dV [\psi^* (\partial_t \psi) + (\partial_t \psi^*) \psi] = \int_V dV [\psi^* \hat{H} \psi - \psi \hat{H}^* \psi^*]. \quad (4.2.19)$$

Használjuk fel, hogy koordináta-reprezentációban

$$\hat{H} = \hat{H}^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}), \quad (4.2.20)$$

ekkor az egyenlet jobb oldala

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \int_V dV [\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_V dV [\vec{\nabla} \cdot (\psi^* \vec{\nabla} \psi) - (\vec{\nabla} \psi^*) \cdot (\vec{\nabla} \psi) - \vec{\nabla} \cdot (\psi \vec{\nabla} \psi^*) + (\vec{\nabla} \psi) \cdot (\vec{\nabla} \psi^*)] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_V dV \vec{\nabla} \cdot [\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*]. \end{aligned} \quad (4.2.21)$$

A következő egyenletet kapjuk tehát:

$$\frac{d}{dt} \int_V dV \psi^* \psi = \frac{i\hbar}{2m} \int_V dV \operatorname{div} [\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*]. \quad (4.2.22)$$

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

$$\frac{d}{dt} \int_V dV \psi^* \psi = \frac{i\hbar}{2m} \int_F dF \vec{n} \cdot [\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*], \quad (4.2.23)$$

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:

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi^* \psi - \frac{i\hbar}{2m} \operatorname{div} [\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*] = 0. \quad (4.2.24)$$

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:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0. \quad (4.2.25)$$

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

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,

$$\int dV \psi^* \psi = 1, \quad (4.2.26)$$

és értéke nem negatív a tér tetszőleges pontjában, tetszőleges időpillanatban

$$\rho = \psi^* \psi = |\psi|^2 \geq 0. \quad (4.2.27)$$

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.

4.2.4 Szabad részecske mozgása inerciarendszerben

Zérus spinű szabad részecske Hamilton-operátora inerciarendszerben

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}. \quad (4.2.28)$$

Ezért koordináta-reprezentációban a szabad részecske Schrödinger-egyenlete:

$$i\partial_t \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t). \quad (4.2.29)$$

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 $\vec{r} \rightarrow \infty$ térbeli végtelenben elég gyorsan eltűnnek ahhoz, hogy a hullámfüggvény négyzetesen integrálható legyen, azaz az

$$\int dV |\psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (4.2.30)$$

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:

$$\begin{aligned}\hat{\vec{p}}\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) &= \vec{p}\psi_{\vec{p}}(\vec{r}), \\ \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) &= \frac{\vec{p}^2}{2m}\psi_{\vec{p}}(\vec{r}),\end{aligned}\quad (4.2.31)$$

ahol a sajátfüggvények:

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \prod_{j=1}^3 \psi_{p_j}(r_j) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \quad (4.2.32)$$

nem fizikai állapotok, mert a normájuk végtelen, de ortonormált teljes rendszert alkotnak a

$$\int dV \psi_{\vec{p}'}^*(\vec{r})\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \delta(\vec{r}' - \vec{r}) \quad (4.2.33)$$

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

$$\psi(\vec{r}, t) = \int d\vec{p} C(\vec{p}, t) \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) \quad (4.2.34)$$

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,

$$f(\vec{r}) = \int d\vec{p} C_0(\vec{p}) \psi_{\vec{p}}(\vec{r}), \quad (4.2.35)$$

ahol a lineárkombinációs együtthatók jelentik a $C(\vec{p}, t)$ együttható-függvényekre vonatkozó kezdeti feltételeket:

$$C(\vec{p}, t_0) = C_0(\vec{p}) = \int dV \psi_{\vec{p}}^*(\vec{r}) f(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int dV e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} f(\vec{r}). \quad (4.2.36)$$

3. Helyettesítsük be a hullámfüggvény impulzus-sajátfüggvények szerinti kifejtését a Schrödinger-egyenletbe:

$$i\hbar \int d\vec{p} \partial_t C(\vec{p}, t) \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \int d\vec{p} C(\vec{p}, t) \frac{\vec{p}^2}{2m} \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) \quad (4.2.37)$$

adódik. Szorozzuk az egyenlet mindkét oldalát $\psi_{\vec{q}}^*(\vec{r})$ függvénnyel és integráljuk a teljes térre:

$$i\hbar \partial_t C(\vec{q}, t) = \frac{\vec{q}^2}{2m} C(\vec{q}, t) \quad (4.2.38)$$

Látjuk, hogy a $C(\vec{q}, t)$ együtthatók időfüggését meghatározó differenciál-egyenletrendszer t kaptunk, amely azonban szerencsésen szétcsatolódott a \vec{q} impulzus különböző értékeihez tartozó együtthatók tekintetében. A kezdeti feltételeket is kielégítő megoldás:

$$C(\vec{q}, t) = C_0(\vec{q})e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{q}^2}{2m}(t-t_0)} \quad (4.2.39)$$

A szabad részecske adott kezdeti feltételhez tartozó mozgását tehát a

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) &= \int d\vec{p} C_0(\vec{p}) e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t-t_0)} \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) \\ &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d\vec{p} C_0(\vec{p}) e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t-t_0) + \frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{r}' \int d\vec{p} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t-t_0) + \frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} f(\vec{r}') \\ &= \left(\frac{m}{i2\pi\hbar(t-t_0)} \right)^{3/2} \int d\vec{r}' f(\vec{r}') \exp\left\{ i \frac{m(\vec{r}-\vec{r}')^2}{2\hbar(t-t_0)} \right\} \end{aligned} \quad (4.2.40)$$

hullámfüggvény írja le.

A hullámcsomag szétfolyása. Vegyük azt az egyszerű példát, amikor a kezdeti hullámfüggvény olyan hullámcsomag, amely csaknem az impulzus \vec{P} sajátértékéhez tartozik, vagyis amelyben a különböző impulzusú sajátfüggvények amplitudója

$$C_0(\vec{p}) = c_0 e^{-\frac{(\vec{p}-\vec{P})^2}{2\sigma^2}}, \quad (4.2.41)$$

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. Számoljuk ki $t - t_0$ idő múlva a hullámfüggvényt:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) &= (2\pi\hbar)^{-3/2} c_0 \int d\vec{p} e^{-\frac{(\vec{p}-\vec{P})^2}{2\sigma^2} - \frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t-t_0) + \frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \\ &\propto A'(t-t_0) \exp\left\{ -\frac{1}{2} \frac{\left[\frac{\vec{P}}{\sigma^2} + \frac{i}{\hbar}\vec{r} \right]^2}{\frac{1}{\sigma^2} + \frac{i(t-t_0)}{\hbar m}} \right\} \\ &\propto A(t-t_0) \exp\left\{ -\frac{1}{2} \frac{\left[\vec{r} - \frac{\vec{P}}{m}(t-t_0) \right]^2}{\frac{\hbar^2}{\sigma^2} + \frac{\sigma^2(t-t_0)^2}{m^2}} \right\}, \end{aligned} \quad (4.2.42)$$

ahol $A'(t-t_0)$ ill. $A(t-t_0)$ az eltelt időtől függő komplex amplitudók, amelyek $t-t_0 \rightarrow \infty$ esetén abszolút értékben $(t-t_0)^{-3/2}$ szerint csökkennek. **A hullámfüggvény alakjából azt olvassuk ki, hogy a hullámcsomag középpontja az**

$$\vec{r} = \frac{\vec{P}}{m}(t-t_0) \quad (4.2.43)$$

egyenlet szerint egyenes vonalú egyenletes mozgást végez $\vec{V} = \frac{\vec{p}}{m}$ sebességgel, miközben - sok idő után a hullámcsomag maximumának abszolút értéke csökken. Közben a hullámcsomag térbeli félszélessége a $\frac{\hbar}{\sigma}$ értékről szigorúan monoton nő a

$$\frac{\hbar}{\sigma'} = \frac{\hbar}{\sigma} \left[1 + \frac{\sigma^4 (t - t_0)^2}{\hbar^2 m^2} \right]^{1/2} \quad (4.2.44)$$

értékre, azaz a hullámcsomag, amely kezdetben $\frac{\hbar}{\sigma}$ méretű tartományra volt lokalizálva, az idő múltával szétfolyik.

A hullámcsomag által leírt részecske impulzusa Descartes-komponenseinek $\Delta p_i = \sqrt{\hat{p}_i^2 - (\bar{p}_i)^2} = \sigma$ szórása nem változik időben, míg a részecske helykoordinátáinak bizonytalansága $\Delta x_i = \hbar/\sigma'$ szigorúan monoton növekszik az eltelt idő függvényében, és

$$\Delta p_i \Delta x_i = \frac{\hbar \sigma}{\sigma'} = \hbar \left[1 + \frac{\sigma^4 (t - t_0)^2}{\hbar^2 m^2} \right]^{1/2} \geq \hbar \quad (4.2.45)$$

alakban teljesül a Heisenberg-féle határozatlansági elv.

4.2.5 Ehrenfest tétele. Newton törvényei?

Vizsgáljuk meg, hogy a kvantummechanikában érvényben maradnak-e Newton törvényei valamilyen általánosított alakban. **Newton 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. **A kvantummechanikában az inerciarendszer megkeresése annak alapján történhet, hogy inerciarendszerben a csaknem jól definiált impulzusú és térben is csaknem lokalizált részecskét leíró hullámcsomag maximuma egyenesvonalú egyenletes mozgást végez.** Az inerciarendszer ilyen módon történő megkeresése a szabad részecskére vonatkozó időtől függő Schrödinger-egyenletnek egy speciális kezdőfeltételhez tartozó megoldásához kötődik.

Általános, tetszőleges állapotra érvényes megállapításokat is kaphatunk, ha az impulzus operátora várható értékének idő szerinti első deriváltját vizsgáljuk. Értelmezése szerint a

$$\dot{\hat{p}} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{H}] \quad (4.2.46)$$

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:

$$\langle \psi(t) | \dot{\hat{p}} | \psi(t) \rangle = \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{p} | \psi(t) \rangle. \quad (4.2.47)$$

Mivel inerciarendszerben a pont részecske Hamilton-operátora általában

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad (4.2.48)$$

alakú, azért a \hat{p} operátor tetszőleges $\psi(\vec{r}, t)$ hullámfüggvényre az alábbiak szerint hat:

$$\begin{aligned}
\hat{p}\psi(\vec{r}, t) &= -\frac{i}{\hbar}[\hat{p}, \hat{H}]\psi(\vec{r}, t) = -\frac{i}{\hbar}[\hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})]\psi(\vec{r}, t) \\
&= -\frac{i}{\hbar}[\hat{p}, V(\vec{r})]\psi(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla} \left[V(\vec{r})\psi(\vec{r}, t) \right] + V(\vec{r}) \left[\vec{\nabla}\psi(\vec{r}, t) \right] \\
&= -\left[\vec{\nabla}V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t) - V(\vec{r}) \left[\vec{\nabla}\psi(\vec{r}, t) \right] + V(\vec{r}) \left[\vec{\nabla}\psi(\vec{r}, t) \right] \\
&= -\left[\vec{\nabla}V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t).
\end{aligned} \tag{4.2.49}$$

Írhatjuk tehát, hogy

$$\hat{p} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{p}, \hat{H}] = -\vec{\nabla}V(\vec{r}). \tag{4.2.50}$$

Inne leolvashatjuk **Ehrenfest tételeit**:

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 egyvonatkoztatási rendszer inerciarendszer.**
2. **Ha a részecskére $\vec{F} = -\vec{\nabla}V(\vec{r})$ 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.**

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: $\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{\Delta x}$. Ekkor a részecske kinetikus energiájának várható értékéhez

$$\overline{\frac{\vec{p}_x^2}{2m}} = \frac{\overline{p_x^2}}{2m} + \frac{[\Delta p_x]^2}{2m} \tag{4.2.51}$$

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:

$$\frac{\overline{p_x^2}}{2m} \gg \frac{(\Delta p_x)^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \equiv T_{\min}. \quad (4.2.52)$$

Tehát keskeny hullámcsomag és 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

$$\tau = \frac{\hbar m}{(\Delta p_x)^2} \leq \frac{m(\Delta x)^2}{\hbar}. \quad (4.2.53)$$

Mivel $\hbar \approx 10^{-32}$ J miatt, az alábbi becsléseket végezhetjük.

| Objektum | m | Δx | τ | T_{\min} |
|----------|----------------------|------------------|---------------------|----------------------------------|
| Föld | $6 \cdot 10^{24}$ kg | $6 \cdot 10^6$ m | $2 \cdot 10^{70}$ s | $\sim 10^{-103}$ J |
| Golyó | 1 kg | 10^{-2} m | 10^{28} s | $\sim 10^{-60}$ J |
| Elektron | 10^{-30} kg | 10^{-15} m | 10^{-28} s | $\sim 10^{-4}$ J $\sim 10^3$ TeV |

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.

4.2.6 Dobozba zárt részecske

Tegyük fel, hogy egy pont részecske 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:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha } x \in (0, L) \\ +\infty, & \text{ha } x = 0 \text{ vagy } x = L \end{cases}, \quad (4.2.54)$$

ahol L a doboz oldalának hossza. A részecske Hamilton-operátora:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(x), \quad (4.2.55)$$

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 hatránál tehát

1. a részecske hullámfüggvényének el kell tűnnie:

$$\psi(x) = 0, \quad \text{ha } x \leq 0 \quad \text{vagy } x \geq L, \quad (4.2.56)$$

2. a részecske hullámfüggvénye első deriváltjának is el kell tűnnie:

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = 0, \quad \text{ha } x = 0 \quad \text{vagy } x = L. \quad (4.2.57)$$

Keressük meg a dobozba zárt részecske stacionárius állapotait. A stacionárius Schrödinger-egyenlet az $x \in [0, L]$ intervallumban

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x) \quad (4.2.58)$$

alakot ölt. Vegyük észre, hogy ennek az egyenletnek a megoldásai

$$\psi_{k_x}(x) = A(k_x)e^{ik_x x} \quad (4.2.59)$$

alakúak. Csakugyan, behelyettesítéssel meggyőződhetünk róla, hogy az ilyen alakú függvények megoldások, ha

$$E_{k_x} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m}. \quad (4.2.60)$$

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:

$$\psi(x) = A_{k_x} \psi_{k_x}(x) + A_{-k_x} \psi_{-k_x}(x). \quad (4.2.61)$$

Ekkor a határfeltételekből:

$$A_{k_x} + A_{-k_x} = 0, \quad A_{k_x} e^{ik_x L} + A_{-k_x} e^{-ik_x L} = 0. \quad (4.2.62)$$

Az A_{k_x} és az A_{-k_x} együtthatókra vonatkozó homogén lineáris egyenletrendszer kaptunk, amelynek akkor és csak akkor van nem triviális megoldása, ha az egyenletrendszer determinánsa zérus, azaz ha

$$\left| \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ e^{ik_x L} & e^{-ik_x L} \end{pmatrix} \right| = 0, \quad \rightarrow \quad e^{-ik_x L} - e^{ik_x L} = -2i \sin(k_x L) = 0. \quad (4.2.63)$$

A determináns csak diszkrét k_x -értékek esetén tűnik el:

$$k_x = n_x \frac{\pi}{L}, \quad n_x = 0, 1, 2, \dots \quad (4.2.64)$$

ahol n_x nem negatív egész számok. Az első határfeltételi egyenletből

$$A_{-k_x} = -A_{k_x}, \quad (4.2.65)$$

úgyhogy a stacionárius Schrödinger-egyenlet megoldásai

$$\psi_{n_x}(x) = 2iA(k_x) \sin(k_x x) \quad (4.2.66)$$

alakúak és rendre az

$$E_{n_x} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n_x^2 \quad (4.2.67)$$

diszkrét energia-sajátértékekhez tartoznak, ahol $n_x = 1, 2, \dots$ 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 fázisfaktoral, megkapjuk a stacionárius állapotok időtől függő hullámfüggvényeit:

$$\Psi_{n_x}(x, t) = 2iA(k_x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n_x}t} \sin\left(n_x \frac{\pi}{L}x\right). \quad (4.2.68)$$

Ez alakját tekintve olyan állóhullám, amelynek csomópontjai vannak a doboz falainál. Mivel $k_x = \frac{2\pi}{\lambda}$, ezért a diszkrét hullámszámokat meghatározó összefüggés

$$L = n_x \frac{\lambda}{2} \quad (4.2.69)$$

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:

$$\begin{aligned} \Psi_{n_x}(x, t) &= A(k_x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n_x}t} \left[\exp\left\{in_x \frac{\pi}{L}x\right\} - \exp\left\{-in_x \frac{\pi}{L}x\right\} \right] \\ &= A(k_x) \left[\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(E_{n_x}t - k_{n_x}\hbar x)\right\} - \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(E_{n_x}t + k_{n_x}\hbar x)\right\} \right]. \end{aligned} \quad (4.2.70)$$

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,

$$\hat{p}_x \psi_{n_x} = k_{n_x} \hbar \psi_{n_x}, \quad (4.2.71)$$

mint arról behelyettesítéssel könnyen meggyőződhetünk.

A stacionárius hullámfüggvényeket normálhatjuk 1-re:

$$\begin{aligned} 1 &= 4 \int_0^L dx |A(k_x)|^2 \sin^2(k_x x) = 4L \frac{|A(k_x)|^2}{k_x L} \int_0^{k_x L} d\xi \sin^2 \xi \\ &= 2L |A(k_x)|^2, \end{aligned} \quad (4.2.72)$$

ahonnan egy lényegtelen fázisfaktor erejéig

$$A(k_x) = \frac{-i}{\sqrt{2L}} \quad (4.2.73)$$

adódik. **A stacionárius megoldások teljes rendszere tehát:**

$$\psi_{n_x}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n_x \frac{\pi}{L}x\right), \quad n_x = 1, 2, 3, \dots \quad (4.2.74)$$

és a megfelelő energiasajátértékek pedig:

$$E_{n_x} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_x^2}{2mL^2}, \quad n_x = 1, 2, 3, \dots \quad (4.2.75)$$

Tanulságos észrevenni, hogy a **dobozba zárt részecskének az alapállapotában is van zérustól különböző energiája:**

$$E_{\text{alap}} = E_{n_x=1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}. \quad (4.2.76)$$

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

$$E_0 \sim \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2mL^2} \quad (4.2.77)$$

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:

$$\int_0^L dx \psi_{n_x}^* \hat{p}_x \psi_{n_x} = \int_0^L dx \psi_{n_x}^* \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi_{n_x} = 0. \quad (4.2.78)$$

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 pont részecske egydimenziós 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 $\hat{x} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{x}, \hat{H}]$ operátorral értelmeztük, ennek várható értéke az n -edik stacionárius állapotban:

$$\begin{aligned} i\hbar \langle n | \hat{x} | n \rangle &= \frac{1}{2m} \langle n | x \hat{p}_x^2 - \hat{p}_x^2 x | n \rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L dx \frac{2}{L} \sin\left(n \frac{\pi}{L} x\right) \left[x \frac{d^2}{dx^2} - \frac{d^2}{dx^2} x \right] \sin\left(n \frac{\pi}{L} x\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L dx \frac{2}{L} \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right) \left[x \frac{d^2}{dx^2} - \left(2\frac{d}{dx} + x \frac{d^2}{dx^2} \right) \right] \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right) \\
&= \frac{2\hbar^2}{mL} n \frac{\pi}{L} \int_0^L dx \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right) \cos\left(n\frac{\pi}{L}x\right) = 0.
\end{aligned} \tag{4.2.79}$$

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:

$$\begin{aligned}
(\Delta x)^2 &= \langle n|\hat{x}^2|n\rangle - (\langle n|\hat{x}|n\rangle)^2 = \langle n|\hat{x}^2|n\rangle - \frac{L^2}{4}, \\
(\Delta p_x)^2 &= \langle n|\hat{p}_x^2|n\rangle - (\langle n|\hat{p}_x|n\rangle)^2 = \langle n|\hat{p}_x^2|n\rangle,
\end{aligned} \tag{4.2.80}$$

ahol felhasználtuk, hogy a p_x impulzus várható értéke zérus bármelyik stacionárius állapotban és az x koordináta várható értéke:

$$\begin{aligned}
\langle n|\hat{x}|n\rangle &= \frac{2}{L} \int_0^L dx x \sin^2\left(n\frac{\pi}{L}x\right) \\
&= \frac{1}{L} \int_0^L dx x \left[1 - \cos\left(n\frac{2\pi}{L}x\right) \right] = \frac{L}{2} - \frac{1}{2n\pi} \left[x \sin\left(n\frac{2\pi}{L}x\right) \Big|_0^L - \int_0^L dx \sin\left(n\frac{2\pi}{L}x\right) \right] \\
&= \frac{L}{2} + \frac{L}{4n^2\pi^2} \cos\left(n\frac{2\pi}{L}x\right) \Big|_0^L \\
&= \frac{L}{2}.
\end{aligned} \tag{4.2.81}$$

Az impulzus négyzetének várható értéke:

$$\langle n|\hat{p}_x^2|n\rangle = 2mE_n = \frac{\hbar^2\pi^2n^2}{L^2}. \tag{4.2.82}$$

A helykoordináta négyzetének a várható értéke:

$$\begin{aligned}
\langle n|\hat{x}^2|n\rangle &= \frac{2}{L} \int_0^L dx x^2 \sin^2\left(n\frac{\pi}{L}x\right) \\
&= \frac{1}{L} \int_0^L dx x^2 \left[1 - \cos\left(n\frac{2\pi}{L}x\right) \right] \\
&= \frac{L^2}{3} - \frac{1}{2n\pi} \left[x^2 \sin\left(n\frac{2\pi}{L}x\right) \Big|_0^L - \int_0^L dx 2x \sin\left(n\frac{2\pi}{L}x\right) \right] \\
&= \frac{L^2}{3} - \frac{L}{4n^2\pi^2} \left[2x \cos\left(n\frac{2\pi}{L}x\right) \Big|_0^L - 2 \int_0^L dx \cos\left(n\frac{2\pi}{L}x\right) \right] \\
&= \frac{L^2}{3} - \frac{L^2}{2n^2\pi^2}.
\end{aligned} \tag{4.2.83}$$

Ezért

$$(\Delta x)^2 = \frac{1}{2}L^2 \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{n^2\pi^2} \right) \tag{4.2.84}$$

és

$$\Delta p_x \Delta x = \hbar\pi \sqrt{\frac{1}{12} \left(n^2 - \frac{1}{\pi^2} \right)} \geq 0,85\hbar \tag{4.2.85}$$

adódik. Látjuk azt is, hogy az alapállapotban a legkisebb a hely és az impulzus bizonytalanságának szorzata, mert a helybizonytalanság tart a $\Delta x \rightarrow L/\sqrt{12}$ értékhez, míg az impulzusbizonytalanság $\Delta p_x \sim n$ szigorúan monoton nő az egyre magasabban gerjesztett állapotokban.

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,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}, \quad (4.2.86)$$

úgyhogy a részecske hullámfüggvénye az x -, az y - és a z -irányú, független mozgásokat leíró hullámfüggvények szorzata:

$$\begin{aligned} \psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) &= \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(n_x \frac{\pi}{L_x} x\right) \sin\left(n_y \frac{\pi}{L_y} y\right) \sin\left(n_z \frac{\pi}{L_z} z\right), \\ E_{n_x, n_y, n_z} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right), \end{aligned} \quad (4.2.87)$$

ahol n_x , n_y és n_z pozitív egész számok.

4.2.7 Lineáris harmonikus oszcillátor

A lineáris harmonikus oszcillátor olyan pont részecske, amelyik a

$$V(x) = \frac{1}{2} D x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (4.2.88)$$

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:

$$\hat{H} = -\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2} D \hat{x}^2, \quad (4.2.89)$$

amely koordináta-reprezentációban

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} D x^2 \quad (4.2.90)$$

alakot ölt. Az egyszerűség kedvéért az x helykoordinátáról érdemes áttérni a

$$\xi = \sqrt{m\omega^2} x \quad (4.2.91)$$

változóra, amelynek segítségével

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \hbar^2 \omega^2 \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2} \xi^2, \quad (4.2.92)$$

és a stacionárius

$$\hat{H}\psi(\xi) = E\psi(\xi) \quad (4.2.93)$$

Schrödinger-egyenlet pedig

$$-\hbar^2\omega^2\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + \xi^2\psi(\xi) = 2E\psi(\xi) \quad (4.2.94)$$

alakot ölt.

Első megállapításunk az, hogy ennek az egyenletnek van - többek között -

$$\psi_0(\xi) = C_0 e^{-\alpha\xi^2} \quad (4.2.95)$$

alakú megoldása. Csakugyan, ha a feltételezett alakot behelyettesítjük a Schrödinger-egyenletbe, azt kapjuk, hogy

$$-\hbar^2\omega^2(-2\alpha + 4\alpha^2\xi^2) + \xi^2 = 2E, \quad (4.2.96)$$

ahonnan

$$(4\alpha^2\hbar^2\omega^2 - 1)\xi^2 = -(2E - 2\alpha\hbar^2\omega^2), \quad (4.2.97)$$

ami akkor és csak akkor teljesülhet a ξ változó tetszőleges értéke esetén, ha az egyenlet bal oldala sem függ ξ -től, azaz ha

$$2\alpha = \pm \frac{1}{\hbar\omega}. \quad (4.2.98)$$

Ekkor azonban

$$E = \frac{1}{2} \cdot 2\alpha\hbar^2\omega^2 = \pm \frac{1}{2}\hbar\omega. \quad (4.2.99)$$

Másrészt a hullámfüggvénynek normálhatónak kell lennie, ami kizárja α negatív értékeit. Így egyetlen megoldást találunk, ami a feltételezett alakú:

$$\psi_0(\xi) = C_0 \exp\left\{-\frac{\xi^2}{2\hbar\omega}\right\}, \quad (4.2.100)$$

és ez az

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (4.2.101)$$

energiasajátértékhez tartozó sajátállapot hullámfüggvénye. A C_0 együttható értékét (egy egységnyi abszolútértékű komplex fázisfaktor erejéig) a

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_0(\xi)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |C_0|^2 \exp\left\{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right\} = |C_0|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} \quad (4.2.102)$$

normálási feltételből határozhatjuk meg:

$$C_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}. \quad (4.2.103)$$

A többi energiasajátértéket és a megfelelő energiasajátállapotok hullámfüggvényeit a ψ_0 megoldásból kapjuk meg. Vezessük be az alábbi operátorokat:

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\xi - \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\frac{d}{d\xi}, \quad \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\xi + \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\frac{d}{d\xi}. \quad (4.2.104)$$

Képezzük a $\hat{n} \equiv \hat{a}^+\hat{a}$ operátort:

$$\hat{n} = \hat{a}^+\hat{a} = \frac{1}{2\hbar\omega}\xi^2 - \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} - \frac{\hbar\omega}{2}\frac{d^2}{d\xi^2} = \left(\hat{H} - \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\frac{1}{\hbar\omega}. \quad (4.2.105)$$

Ennek segítségével a Hamilton-operátor

$$\hat{H} = \hbar\omega\hat{n} + \frac{1}{2}\hbar\omega = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \quad (4.2.106)$$

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:

1. Képezzük az $\hat{a}\hat{a}^+$ operátor-szorzatot:

$$\hat{a}\hat{a}^+ = \frac{1}{2\hbar\omega}\xi^2 + \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} - \frac{\hbar\omega}{2}\frac{d^2}{d\xi^2}. \quad (4.2.107)$$

Ezt és $\hat{a}^+\hat{a}$ -ra vonatkozó korábbi eredményünket felhasználva,

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{1} \quad (4.2.108)$$

adódik.

2. Az előző pontban meghatározott kommutátor segítségével kapjuk, hogy

$$[\hat{a}^+\hat{a}, \hat{a}] = -\hat{a}, \quad [\hat{a}^+\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+. \quad (4.2.109)$$

Valóban, rendre

$$\begin{aligned} [\hat{a}^+\hat{a}, \hat{a}] &= \hat{a}^+\hat{a}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^+\hat{a} = \hat{a}^+\hat{a}\hat{a} - (1 + \hat{a}^+\hat{a})\hat{a} = -\hat{a}, \\ [\hat{a}^+\hat{a}, \hat{a}^+] &= \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a} = \hat{a}^+(1 + \hat{a}^+\hat{a}) - \hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a} = \hat{a}^+. \end{aligned} \quad (4.2.110)$$

Ezután vegyünk egy tetszőleges ψ_ν állapotot, amely az \hat{n} operátornak valamelyik, egyelőre ismeretlen ν sajátértékéhez tartozó sajátállapota:

$$\hat{n}\psi_\nu = \nu\psi_\nu. \quad (4.2.111)$$

A fenti csererelációk alapján könnyű észrevenni, hogy

$$\hat{n}(\hat{a}\psi_\nu) = (\nu - 1)(\hat{a}\psi_\nu), \quad \hat{n}(\hat{a}^+\psi_\nu) = (\nu + 1)(\hat{a}^+\psi_\nu). \quad (4.2.112)$$

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. Kivétel az az eset, amikor az \hat{a} lefelé léptető operátor a ψ_0 állapotra hat, ekkor ugyanis nullát kapunk eredményül:

$$\hat{a}\psi_0(\xi) = \left[\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\xi + \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} \frac{d}{d\xi} \right] C_0 e^{-\alpha\xi^2} = 0. \quad (4.2.113)$$

Vegyük továbbá észre, hogy a léptető operátorok definíciójában

$$\pm \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} \frac{d}{d\xi} \sim \pm \frac{d}{dx} \sim \pm i\hat{p}_x, \quad (4.2.114)$$

úgyhogy - \hat{x} és \hat{p}_x önadjungáltak lévén - a léptető operátorok egymásnak adjungáltjai:

$$\hat{a}^+ = (\hat{a})^\dagger. \quad (4.2.115)$$

Mivel bármely $\hat{a}\psi_\nu$ állapot normanégyzete nem negatív,

$$0 \leq \|\hat{a}\psi_\nu\|^2 = \langle \psi_\nu | \hat{a}^+ \hat{a} | \psi_\nu \rangle = \nu \langle \psi_\nu | \psi_\nu \rangle = \nu, \quad (4.2.116)$$

azaz az \hat{n} operátor minden sajátértéke nem negatív. Mivel a nulla a sajátértékek között van, ezért **az \hat{n} operátor sajátállapotainak és a hozzájuk tartozó sajátértékeknek a teljes rendszere:**

$$\begin{aligned} \psi_0, \quad \nu_0 = 0, \\ \psi_1 = C_1 \hat{a}^+ \psi_0, \quad \nu_1 = 1 \\ \vdots \\ \psi_n = C_n (\hat{a}^+)^n \psi_0, \quad \nu_n = n, \\ \vdots \end{aligned} \quad (4.2.117)$$

ahol $n = 0, 1, 2, \dots$ nem negatív egész számok. A kapott sajátállapotok egyúttal a \hat{H} Hamilton-operátornak is sajátállapotai rendre az

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (4.2.118)$$

sajátértékekkel. Érdeemes 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 zérusponthoz tartozó rezgéseket végez, amelyek energiája $\frac{1}{2}\hbar\omega$.**
2. **A lineáris harmonikus oszcillátor gerjesztett állapotai diszkrét, 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 „részcsekszám”-operátornak nevezni. Az elnevezés kicsit félrevezető, mert „részcsekszámon” itt a gerjesztett oszcillátor által hordozott elemi energiaadagok számát kell érteni.**

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 $\hat{x} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{x}, \hat{H}]$ sebességének várható értéke is zérus.

Végül **ellenőrizzük az alapállapot példáján, hogy teljesül a határozatlansági reláció.** Mivel a helykoordináta és az impulzus várható értéke zérus, a szórásnégyzetek:

$$\begin{aligned}
(\Delta x)^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx C_0^2 e^{-2\alpha\xi^2} x^2 \\
&= \frac{C_0^2}{(m\omega^2)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-2\alpha\xi^2} \xi^2 = -\frac{C_0^2}{2(m\omega^2)^{3/2}} \frac{d}{d\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \\
&= \frac{C_0^2 \sqrt{\pi}}{2(2m\omega^2\alpha)^{3/2}}, \\
(\Delta p_x)^2 &= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx C_0^2 e^{-\alpha\xi^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\alpha\xi^2} \\
&= -C_0^2 \hbar^2 \sqrt{m\omega^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\alpha\xi^2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} e^{-\alpha\xi^2} \\
&= 2\alpha C_0^2 \hbar^2 \sqrt{m\omega^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-2\alpha\xi^2} (1 - 2\alpha\xi^2) \\
&= 2\alpha C_0^2 \hbar^2 \sqrt{m\omega^2} \left(1 + \alpha \frac{d}{d\alpha}\right) \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} = C_0^2 \hbar^2 \sqrt{\frac{1}{2} m\omega^2 \pi \alpha}. \quad (4.2.119)
\end{aligned}$$

Ebből következik, hogy

$$(\Delta p_x)^2 (\Delta x)^2 = \frac{\hbar^2 C_0^4 \pi}{8\alpha m\omega^2} = \frac{\hbar^2}{4}, \quad (4.2.120)$$

azaz

$$\Delta p_x \Delta x = \frac{1}{2} \hbar. \quad (4.2.121)$$

4.2.8 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 pont részecske Schrödinger-egyenletét gömbi polárkoordinátákban felírni. A $V(r)$ potenciálban mozgó részecske Hamilton-operátora koordináta-reprezentációban

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \quad (4.2.122)$$

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:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{\ell}^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi). \quad (4.2.123)$$

A gömbszimmetrikus rendszer Hamilton-operátora felcserélhető az $\hat{\ell}^2$ és az $\hat{\ell}_z$ operátorokkal, ahol a z -tengely irányát tetszőlegesen választhatjuk:

$$[\hat{\ell}^2, \hat{H}] = 0, \quad [\hat{\ell}_z, \hat{H}] = 0. \quad (4.2.124)$$

Ezért a \hat{H} , $\hat{\ell}^2$ és $\hat{\ell}_z$ operátoroknak van közös sajátfüggvény-rendszerük. Ez azt jelenti, 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, mivel a Hamilton-operátor a gömbszimmetria miatt csak $\hat{\ell}^2$ -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 multipliettje tartozik.** Ha $\ell = 0$ ill. $\ell = 1$, akkor speciálisan rendre szinglettről ($2 \cdot 0 + 1 = 1$ 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

$$\psi_{E,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = R_{E,\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad (4.2.125)$$

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:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2mr^2} + V(r) \right] R_{E,\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = E R_{E,\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad (4.2.126)$$

ahonnan az alábbi, ún. radiális Schrödinger-egyenletet kapjuk a stacionárius állapot radiális hullámfüggvényére:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R_{E,\ell}(r) = ER_{E,\ell}(r). \quad (4.2.127)$$

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

$$R(r) = \frac{1}{r} \chi(r). \quad (4.2.128)$$

Helyettesítsük ezt be a radiális hullámegyenletbe és használjuk fel, hogy

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \frac{\chi(r)}{r} \right) &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \left(\frac{1}{r} \frac{d\chi}{dr} - \frac{\chi}{r^2} \right) \right) \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{d\chi}{dr} - \chi \right) = \frac{1}{r^2} \left(\frac{d\chi}{dr} + r \frac{d^2\chi}{dr^2} - \frac{d\chi}{dr} \right) \\ &= \frac{1}{r} \frac{d^2\chi}{dr^2}, \end{aligned} \quad (4.2.129)$$

akkor az alábbi egyenletet kapjuk:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r)\chi(r) = E\chi(r), \quad (4.2.130)$$

ahol bevezettük a

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \quad (4.2.131)$$

effektív potenciális energiát. **A $\chi(r) = rR(r)$ radiális hullámfüggvényre olyan egydimenziós feladatot kaptunk, amelyikben a potenciális energia szerepét a $V_{\text{eff}}(r)$ effektív potenciális energia játssza. Az utóbbi két tagból tevődik össze, a részecske pályamozgásából származó**

$$\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} \quad (4.2.132)$$

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 $r \rightarrow \infty$ esetén milyen határfeltételeket kell kielégítenie. Ha a potenciál az egész térben korlátos, akkor a radiális hullámfüggvény

is az, úgyhogy az origóban $\chi(0) = 0$ kell legyen, hogy a radiális hullámfüggvény ott is korlátos maradjon. Ez a tulajdonság akkor is érvényben marad, ha a potenciál az origóban végtelenhez tart. Ezért **olyan megoldásokat fogunk keresni, amelyekre**

$$\chi(0) = 0. \quad (4.2.133)$$

A realiztikus potenciálok olyanok, hogy $r^2V(r) \rightarrow 0$, ha $r \rightarrow 0$. Ilyen a Coulomb-potenciál és ilyen a harmonikus oszcillátor potenciálja is. Ekkor a radiális Schrödinger-egyenlet az origó körüli tartományban

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2}\chi = 0 \quad (4.2.134)$$

alakú, ha csak a vezető rendű tagokat őrizzük meg. Keressük a megoldást az origó környezetében $\chi \sim r^a$ alakban. Ekkor

$$a(a-1) = \ell(\ell+1) \quad (4.2.135)$$

adódik az ismeretlen a kitevőre. Az egyenletnek 2 megoldása van, $a = \ell$ és $a = -(\ell+1)$. 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**

$$\chi(r) \sim r^\ell \quad (4.2.136)$$

alakú.

Válasszuk a továbbiakban a potenciális energia nullszintjét a végtelenben: $V(r) \rightarrow 0$, ha $r \rightarrow \infty$. 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 állapotokkal 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 $r \rightarrow \infty$ 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 $r \rightarrow \infty$. Ebben, a potenciál centrumától távoli tartományban a radiális Schrödinger-egyenlet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi_{asz}(r)}{dr^2} = -\epsilon\chi_{asz}(r) \quad (4.2.137)$$

alakot ölt. Átrendezve:

$$\frac{d^2\chi_{asz}(r)}{dr^2} = \frac{2m\epsilon}{\hbar^2}\chi_{asz}(r) \equiv \alpha^2\chi_{asz}(r), \quad (4.2.138)$$

aminek a független megoldásai:

$$e^{-\alpha r}, \quad e^{\alpha r} \quad (4.2.139)$$

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 ($r \rightarrow \infty$)

$$\chi_{\text{asz}}(r) \sim e^{-\alpha r}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}} > 0 \quad (4.2.140)$$

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 $n_r = 0, 1, 2, \dots$ 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 egy-dimenziós 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 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 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 $\tau = 2 \cdot 10^{70}$ s, a klasszikussághoz szükséges minimális kinetikus energia pedig $T_{\min} \approx 10^{-103}$ 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, $T_{\min} \sim 10^3$ TeV nagyságrendű kinetikus energiához képest.

4.2.9 Hidrogénatom

A hidrogén atom és a klasszikus fizika

A hidrogén atom (H) 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 ($m_p c^2 = 1 \text{ GeV}$) mint az elektronnak ($m_e c^2 = 511 \text{ keV}$). 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-potenciáletteret hoz létre. Ebben helyezkedik el az elektron, amelynek $-e$ a töltése és így a potenciális energiája

$$-\alpha \frac{e^2}{r}, \quad (4.2.141)$$

ha r az elektron távolsága a protontól; α az egységrendszer megválasztásától függő állandó.

A klasszikus mechanikai felfogás szerint az atommag Coulomb-potenciáljában elhelyezkedő elektronnra sugárirányú vonzó erő hat, amely azt a centripetális gyorsulást tudja fenntartani Newton II. törvénye értelmében, ami ahhoz szükséges, hogy az elektron körpályán maradjon,

$$\alpha \frac{e^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r}, \quad (4.2.142)$$

ahol v az elektron kerületi sebessége. Ha az elektron megmaradó energiája $E < 0$, akkor erre

$$-\alpha \frac{e^2}{r} + \frac{1}{2} m_e v^2 = E, \quad (4.2.143)$$

ahonnan

$$\frac{m_e v^2}{r} = 2 \left(\frac{E}{r} + \alpha \frac{e^2}{r^2} \right). \quad (4.2.144)$$

Ezt Newton II. törvényével összehasonlítva,

$$\alpha \frac{e^2}{r^2} = -\frac{2E}{r} \quad (4.2.145)$$

adódik, úgyhogy az $E < 0$ energiájú elektronnak

$$r = \alpha \frac{e^2}{-2E} \quad (4.2.146)$$

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 $E \rightarrow -\infty$ esetén $r \rightarrow 0$.) **A klasszikus fizikán alapuló modell tehát nem tudja megmagyarázni, hogy miért stabil rendszer a H-atom.** Másodsor 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 pont részecske stacionárius állapotaira vonatkozó korábbi ismereteinket kell csak alkalmazni. Annyiban kell óvatosan eljárunk, 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:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_p}\Delta_{\vec{r}_p} - \frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_{\vec{r}_e} - \alpha\frac{e^2}{|\vec{r}_p - \vec{r}_e|}, \quad (4.2.147)$$

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:

$$\vec{R} = \frac{m_p\vec{r}_p + m_e\vec{r}_e}{m_p + m_e}, \quad \vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_p. \quad (4.2.148)$$

Az új változók segítségével a Hamilton-operátorban szeparálódik a tömegközéppont helyzetvektorától és a relatív helyzetvektortól való függés:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2(m_p + m_e)}\Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}} - \alpha\frac{e^2}{r}, \quad (4.2.149)$$

ahol

$$\mu = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} \quad (4.2.150)$$

a problémához tartozó **redukált tömeg**. A változók szétválásának következtében a

$$\hat{H}\psi(\vec{R}, \vec{r}) = E_{\text{atom}}\psi(\vec{R}, \vec{r}) \quad (4.2.151)$$

stacionárius Schrödinger egyenlet megoldása

$$\psi(\vec{R}, \vec{r}) = \Phi(\vec{R})\phi(\vec{r}) \quad (4.2.152)$$

alakú, ahol a $\Phi(\vec{R})$ hullámfüggvény a H-atomnak egészének a szabad mozgását írja le:

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_p + m_e)}\Delta_{\vec{R}}\Phi(\vec{R}) = \frac{\vec{P}^2}{2(m_p + m_e)}\Phi(\vec{R}), \quad (4.2.153)$$

ahol a jobb oldalon szereplő energiasajátértéket mindjárt a szabad mozgás kinetikus energiájának a szokásos, az atom teljes \vec{P} impulzusával kifejezett alakban írtuk fel. **Ekkor az elektronnak az atommaghoz képesti relatív mozgását leíró $\phi(\vec{r})$ hullámfüggvényre, azaz a H-atomon belüli belső mozgásra vonatkozó hullámfüggvényre a**

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} - \alpha \frac{e^2}{r} \right] \phi(\vec{r}) = E \phi(\vec{r}) \quad (4.2.154)$$

alakú stacionárius Schrödinger-egyenletet kapjuk, ahol E a H-atom energiája az atom tömegközépponti rendszerében:

$$E_{\text{atom}} = \frac{\vec{P}^2}{2(m_p + m_e)} + E. \quad (4.2.155)$$

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 egy-részecskés 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

$$\hat{H}_{\text{rel}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2 \hat{\ell}^2}{2\mu r^2} - \alpha \frac{e^2}{r} \quad (4.2.156)$$

Hamilton-operátor felcserélhető az elektron pályaimpulzuszmomentuma négyzetének operátorával és a pályaimpulzuszmomentum tetszőleges, z -tengelyre vett vetületének az operátorával,

$$[\hat{H}_{\text{rel}}, \hat{\ell}^2] = 0, \quad [\hat{H}_{\text{rel}}, \hat{\ell}_z] = 0, \quad (4.2.157)$$

azért a relatív mozgás Hamilton-operátorának és az $\hat{\ell}^2$ és $\hat{\ell}_z$ operátoroknak van közös sajátfüggvény-rendszere. A relatív mozgás hullámfüggvénye tehát

$$\phi_{E,\ell,m}(\vec{r}) = R_{E,\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad (4.2.158)$$

alakú, ahol $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$ és $\hbar m$ rendre az impulzuszmomentum négyzetének és z -irányú vetületének a sajátértékei. A radiális hullámfüggvényre, $R_{E,\ell} = \frac{\chi_{E,\ell}}{r}$ vonatkozó hullámegyenlet most

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2\mu r^2} - \alpha \frac{e^2}{r} \right] R_{E,\ell}(r) = E R_{E,\ell}(r). \quad (4.2.159)$$

alakú. Hozzuk ezt

$$\frac{d^2 R_{E,\ell}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{E,\ell}(r)}{dr} - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} R_{E,\ell}(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \alpha \frac{e^2}{r} \right) R_{E,\ell}(r) = 0 \quad (4.2.160)$$

alakra. Vezessük be az

$$E' = \frac{\hbar^2}{\mu \alpha^2 e^4} E, \quad r' = \frac{\mu \alpha e^2}{\hbar^2} r, \quad R'_{E,\ell}(r') = \left[\frac{\mu \alpha e^2}{\hbar^2} \right]^2 R_{E,\ell}(r) \quad (4.2.161)$$

jelöléseket, akkor

$$\frac{d^2 R'_{E',\ell}(r')}{dr'^2} + \frac{2}{r'} \frac{dR'_{E',\ell}(r')}{dr'} - \frac{\ell(\ell+1)}{r'^2} R'_{E',\ell}(r') + 2 \left(E' + \frac{1}{r'} \right) R'_{E',\ell}(r') = 0 \quad (4.2.162)$$

A kötött állapotok azok, amelyeknek az energiája negatív (ha a potenciális energia additív állandóját úgy választottuk, hogy a potenciális energia a végtelenben nullává váljon: $V \rightarrow 0$, ha $r' \rightarrow \infty$). Ezt onnan látjuk, hogy $r' \rightarrow \infty$ esetén a radiális hullámfüggvényre vonatkozó differenciálegyenlet

$$\frac{d^2 R'_{E',\ell}(r')}{dr'^2} = -2E' R'_{E',\ell}(r') \quad (4.2.163)$$

alakot ölt. Így az aszimptotikusan távoli tartományban a radiális hullámfüggvény exponenciális függvény:

$$R'_{E',\ell}(r') \sim \exp\{\pm\sqrt{-2E'}r'\}. \quad (4.2.164)$$

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 energiasaj**

atérték határozza meg: minél kisebb $|E'|$, azaz minélmagasabban 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

$$n = \frac{1}{\sqrt{-2E'}}, \quad \rho = \frac{2r'}{n}, \quad \mathcal{R}_{n,\ell}(\rho) = R'_{E',\ell}(r') \quad (4.2.165)$$

átjelöléseket:

$$\frac{d^2 \mathcal{R}_{n,\ell}(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d\mathcal{R}_{n,\ell}(\rho)}{d\rho} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] \mathcal{R}_{n,\ell}(\rho) = 0. \quad (4.2.166)$$

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:

$$\frac{d^2\mathcal{R}_{n,\ell}(\rho)}{d\rho^2} - \frac{1}{4}\mathcal{R}_{n,\ell}(\rho) = 0, \quad (4.2.167)$$

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

$$\mathcal{R}_{n,\ell}(\rho) = \rho^\ell e^{-\frac{1}{2}\rho} w_{n,\ell}(\rho) \quad (4.2.168)$$

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

$$\rho \frac{d^2w(\rho)}{d\rho^2} + (2\ell + 2 - \rho) \frac{dw(\rho)}{d\rho} + (n - \ell - 1)w(\rho) = 0 \quad (4.2.169)$$

differenciálegyenletnek. A fenti határértékfeladatnak akkor és csak akkor van megoldása, ha

$$n - \ell - 1 \geq 0 \quad \text{és egész szám.} \quad (4.2.170)$$

Mivel ℓ egész szám, azért innen $n \geq \ell + 1$ is egész szám. **A megoldások olyan ún. hipergeometrikus függvények, $w_{n,\ell}(\rho) = F(-n + \ell + 1, 2\ell + 2, \rho)$, amelyeknek első két paramétere egész szám. Az energiasajátértékeket az $n = 1, 2, \dots$ ún. főkvantumszám sorszámozza növekvő sorrendben:**

$$E' = -\frac{1}{2n^2}, \quad \text{ill. } E = -\frac{\mu\alpha^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} \approx \frac{27 \text{ eV}}{2n^2}. \quad (4.2.171)$$

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, az az 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,

$$\ell = 0, 1, \dots, n - 1 \quad (4.2.172)$$

mellett valósulhatnak meg:

| Főkvantumszám | Lehetséges pályák |
|---------------|-------------------|
| $n = 1$ | 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:

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2. \quad (4.2.173)$$

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 hullámüggvények exponenciálisan lecsengenek nagy r távolságban, s ezzel együtt a térfogategységben való megtalálási valószínűség is exponenciálisan lecseng az aszimptotikus tartományban:

$$\sim r^2 dr e^{-\rho} \sim r^2 dr e^{-\frac{2r'}{n}} \sim r^2 dr \exp\left\{-\frac{2\mu\alpha e^2}{n\hbar^2} r\right\} \sim r^2 dr \exp\left\{-\frac{2r}{r_B}\right\}, \quad (4.2.174)$$

ahol

$$r_B = \frac{\hbar^2}{\mu\alpha e^2} \approx 0,5 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (4.2.175)$$

az ún. **Bohr-sugár**. Alább megadjuk a radiális hullámüggvény 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 | $R'_{n,\ell}(r')$ | \bar{r} | $\overline{r^2}$ |
|-----------|--|------------------|------------------|
| 1, 0 | $2e^{-r'}$ | $\frac{3}{2}r_B$ | $3r_B^2$ |
| 2, 0 | $\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{1}{2}r'}\left(1 - \frac{1}{2}r'\right)$ | $6r_B$ | $42r_B^2$ |
| 2, 1 | $\frac{1}{2\sqrt{6}}e^{-\frac{1}{2}r'}r'$ | $5r_B$ | $30r_B^2$ |

Látjuk, hogy a Bohr-sugár nagyságrendileg egyenlő az alapállapotban az elektronnak a protontól mért átlagos távolságától.

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 nem végez haladó mozgást, az elektron impulzusának a várható értéke**

zérus. Csakugyan, az impulzus operátorának komponensei gömbi polárkoordináta rendszerben:

$$\hat{p}_r = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r}, \quad \hat{p}_\theta = \frac{\hbar}{ir} \frac{\partial}{\partial \theta}, \quad \hat{p}_\varphi = \frac{\hbar}{ir \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (4.2.176)$$

az alapállapot hullámfüggvénye pedig nem függ a θ és φ szögektől, így $\langle 100 | \hat{p}_\theta | 100 \rangle = \langle 100 | \hat{p}_\varphi | 100 \rangle = 0$ nyilvánvalóan teljesül, másrészt

$$\begin{aligned} \langle 100 | \hat{p}_r | 100 \rangle &= \frac{\hbar}{i} \int_0^\infty r^2 dr \frac{e^{-\frac{r}{r_B}}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{-\frac{r}{r_B}}}{r} = \frac{\hbar}{i} \int_0^\infty r^2 dr e^{-\frac{2r}{r_B}} \left(-\frac{1}{r^3} - \frac{1}{r_B r^2} \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \int_0^\infty dr e^{-\frac{2r}{r_B}} \left(-\frac{1}{r} - \frac{1}{r_B} \right) = 0. \end{aligned} \quad (4.2.177)$$

Meghatározhatjuk a valószínűségi áramsűrűséget is:

$$\vec{j} = \frac{\hbar i}{2\mu} (\psi_{100} \vec{\nabla} \psi_{100}^* - \psi_{100}^* \vec{\nabla} \psi_{100}) = 0, \quad (4.2.178)$$

ami nullának adódik, mert az alapállapot hullámfüggvénye valós, ha valósnak választjuk a normálási tényezőt. **Az alapállapotú H-atomban tehát nem folyik sem valószínűségi áram, sem töltésáram.** Az utóbbi a valószínűségi áramnak és az elektron $-e$ töltésének ($e > 0$) a szorzata. **Ha nem folyik áram, az elektron nem végez haladó mozgást, akkor nem is gyorsul, úgyhogy nem is kell, hogy elektromágneses sugárzást bocsásson ki. A H-atom alapállapota tehát stabil az elektromágneses sugárzással történő elbomlással szemben.**

Az elektronnak noha nem végez haladó mozgást, 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 nem végez haladó mozgást, de „nyüzög”, vagy másszóval zérusponti kvantumfluktuációi vannak. Ez a nyüzgés 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 $\Delta p \sim \hbar/\Delta x$ szerint. Így az elektron energiája közelítőleg

$$E(\Delta r) \approx \frac{(\Delta p)^2}{2\mu} - \alpha \frac{e^2}{\Delta r} \approx \frac{\hbar^2}{2\mu(\Delta r)^2} - \alpha \frac{e^2}{\Delta r} \quad (4.2.179)$$

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:

$$\frac{dE(\Delta r)}{d\Delta r} = -\frac{\hbar^2}{\mu(\Delta r)^3} + \alpha \frac{e^2}{(\Delta r)^2} = 0 \quad (4.2.180)$$

ahonnan

$$\Delta r \approx \frac{\hbar^2}{\mu \alpha e^2} = r_B. \quad (4.2.181)$$

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,

$$j_r = j_\theta = 0, \quad (4.2.182)$$

de a valószínűségi áramsűrűség j_φ komponense lehet zérustól különböző:

$$j_\varphi = \frac{i\hbar}{2\mu r \sin\theta} [\psi_{n\ell,m} \partial_\varphi \psi_{n\ell,m}^* - \psi_{n\ell,m}^* \partial_\varphi \psi_{n\ell,m}] \quad (4.2.183)$$

Tudjuk, hogy a stacionárius állapotok hullámfüggvényei φ -től $e^{im\varphi}$ alakban függnek, ezért

$$j_\varphi = \frac{m\hbar}{\mu r \sin\theta} |\psi_{n\ell,m}|^2, \quad (4.2.184)$$

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 $di = j_\varphi r d\theta dr$ köráramok az általuk körülfolyt $A = \pi r^2 \sin^2\theta$ felülettel arányos

$$dM_z = -\frac{e}{c} A di = -\frac{e}{c} dr r d\theta j_\varphi \pi r^2 \sin^2\theta \quad (4.2.185)$$

járulékot adnak a mágneses momentumhoz. Ha ezeket a járulékokat az összes elemi köráramra felösszegezzük, akkor megkapjuk a teljes mágneses momentumot:

$$\begin{aligned} M_z &= -\frac{em\hbar}{2\mu c} \int_0^\infty dr r 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin\theta |\psi_{n\ell,m}|^2 \\ &= -\frac{em\hbar}{2\mu c} \int dV |\psi_{n\ell,m}|^2 = -\frac{em\hbar}{2\mu c} \equiv -m\mu_B \end{aligned} \quad (4.2.186)$$

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

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2\mu c} \quad (4.2.187)$$

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:

$$M_z = -\frac{e}{2\mu c} \ell_z. \quad (4.2.188)$$

A pályaimpulzusmomentum és z -irányú vetületének értéke, azaz a 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. 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.

4.2.10 Részecske szóródása centrális potenciálon. Szórási amplitúdó és hatáskeresztmetszet

Ha a részecske olyan potenciálban mozog, amely a térbeli végtelenben eltűnik és energiája pozitív, akkor a Schrödinger-egyenlet stacionárius megoldásait szórási állapotoknak nevezzük. Ezeket az jellemzi, hogy ki- vagy befutó gömbhullámok. Az ilyen hullámfüggvények nem négyzetesen integrálhatóak, és nem tartoznak a valóságos fizikai állapotok közé. A megfelelő, időtől függő Schrödinger-egyenlet megoldásai azonban stacionárius szórási állapotokból lineárisan kombinálható, alkalmas időfüggéssel rendelkező együtthatókkal. Ezért a stacionárius szórási állapotok alapján már képet kaphatunk a részecskék potenciálon történő szóródásáról.

A szórási folyamat. Vizsgáljuk először meg, hogy mit is nevezünk szórásnak. Tegyük fel, hogy egy gyorsítóval előállítunk a potenciál centrumától távol egy részecskét, amelynek csaknem jól definiált impulzusa van. A hullámfüggvénye egy olyan hullámcsomag, amelyben egy meghatározott \vec{p}_{be} impulzushoz közeli impulzusú síkhullámok szerepelnek csak számottevő amplitudóval. A „befutó” hullámcsomag megközelíti a potenciál centrumát, azzal kölcsönhat, majd a hullámcsomag „egy része” lényegében változatlanul tovább halad, míg a másik része „szóródik”. Meg lehet mutatni a probléma időfüggő tárgyalása során, hogy a „szórt hullám” frontja a „szórás nélkül továbbhaladó” hullám frontjához képest vagy siet vagy elmarad, és gömbhullámként különböző irányokba, különböző amplitudóval szóródik szét. Ha a bejövő hullámcsomagot a centrumtól távol az e^{ikz} síkhullámmal közelítjük, ahol $\hbar k = p_{be}$, akkor a szórás után, a szórócentrumtól nagy távolságban a hullámfüggvény helyfüggése

$$\psi \sim e^{ikz} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (4.2.189)$$

lesz, ahol a második tag írja le a szórt hullámot és $f(\theta, \varphi)$ a szórási amplitúdó, amely meghatározza a szórt hullám amplitudóját a különböző irányokban.

A differenciális szórási hatáskeresztmetszet. A szórási folyamatot a differenciális szórási hatáskeresztmetszettel lehet jellemezni. Számoljuk ki a bejövő síkhullámhoz tartozó valószínűségi áramsűrűséget:

$$j_{be} = |C|^2 \frac{i\hbar}{2m} (e^{ikz} \frac{d}{dz} e^{-ikz} - e^{-ikz} \frac{d}{dz} e^{ikz}) = |C|^2 \frac{k\hbar}{m}. \quad (4.2.190)$$

A szórt hullám valószínűségi áramsűrűségének radiális komponense pedig:

$$j_{sz} = |C|^2 |f(\theta, \varphi)|^2 \frac{1}{r^2} \frac{i\hbar}{2m} \left(e^{ikr} \frac{d}{dr} e^{-ikr} - e^{-ikr} \frac{d}{dr} e^{ikr} \right) = |C|^2 |f(\theta, \varphi)|^2 \frac{1}{r^2} \frac{k\hbar}{m}. \quad (4.2.191)$$

A szórócentrumtól r távolságra elhelyezkedő gömbfelület $r^2 d\Omega$ felületelemén átlépő, szórt részecskék száma

$$dN_{sz} = j_{sz} r^2 d\Omega = |C|^2 |f(\theta, \varphi)|^2 \frac{k\hbar}{m} d\Omega. \quad (4.2.192)$$

A szórás differenciális hatáskeresztmetszetén az adott, infinitezimális $d\Omega$ térszögelembe időegység alatt szórt részecskék számának és a bejövő nyaláb valószínűségi áramsűrűségének (időegység alatt a nyalábra merőleges egységnyi felületen átlépő részecskék számának) **a hányadosát értjük:**

$$d\sigma = \frac{dN_{sz}}{j_{be}} = \frac{j_{sz} r^2 d\Omega}{j_{be}} = \frac{|C|^2 |f(\theta, \varphi)|^2 \frac{k\hbar}{m} d\Omega}{|C|^2 \frac{k\hbar}{m}} = |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega. \quad (4.2.193)$$

Látjuk, hogy a **differenciális szórási hatáskeresztmetszet a szórási amplitudó abszolút értéke négyzetének és az infinitezimális térszögelemnek a szorzata.**

Parciális hullámokra bontás. Az itt nem részletezett módszerrel, **a hullámfüggvénynek parciális hullámokra történő bontásával** 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 bonthatjuk és meghatározhatjuk külön-külön minden egyes ilyen rész hullám (parciális hullám) hozzájárulását a szórási amplitudóhoz:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \left(e^{2i\delta_\ell} - 1 \right) P_\ell(\cos \theta) \equiv \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) f_\ell P_\ell(\cos \theta), \quad (4.2.194)$$

ahol felhasználtuk a befutó részecske iránya körüli tengelyszimmetriát. Itt $P_\ell(\xi)$ az ún. ℓ -edrendű **Legendre-polinom**, δ_ℓ pedig a **kifutó gömbhullám fázistolódása** a potenciál centrumától távol, amelyet a radiális Schrödinger-egyenlet megoldásának aszimptotikus alakjából kell kiolvasni. Az

$$f_\ell = \frac{1}{2ik} \left(e^{2i\delta_\ell} - 1 \right) \quad (4.2.195)$$

mennyiségeket **parciális amplitudóknak** szokás nevezni. **A teljes szórási amplitudó az egyes parciális amplitudóknak a megfelelő Legendre-polinomokkal és a pályamomentum vetületének multiplicitásával súlyozott összege.** Az **integrális szórási hatáskeresztmetszet,**

$$\sigma = \int d\sigma = \int d\Omega |f(\theta)|^2 = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_\ell \quad (4.2.196)$$

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

$$\sigma_\ell = 4\pi(2\ell+1) |f_\ell|^2. \quad (4.2.197)$$

Az integrális szórási hatáskeresztmetszet a σ_ℓ parciális hatáskeresztmetszetek összege.

4.2.11 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 $x \rightarrow \pm\infty$ aszimptotikusan távoli pontokban zérushoz tart. Legyen V_0 a potenciál értéke a maximumban, úgyhogy $0 \leq V(x) \leq V_0$. Miért beszélünk ekkor potenciálgatról? Az elnevezés a klasszikus mechanikából származik. Ha egy klasszikus pontrészecske E energiával mozog a fenti potenciálban, akkor érvényes rá az energiamegmaradás törvénye:

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + V(x), \quad (4.2.198)$$

ahonnan a részecske impulzusa, mint a hely függvénye

$$p_x = \pm\sqrt{2m(E - V(x))} \quad (4.2.199)$$

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, $x \rightarrow -\infty$ tartományból a részecske, amelynek kezdetben teljes energiája kinetikus energia,

$$p_x(x \rightarrow -\infty) = \sqrt{2mE}. \quad (4.2.200)$$

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,

$$E = V(x_-). \quad (4.2.201)$$

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 $x \rightarrow +\infty$ 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

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha } x < 0 \\ V_0 > 0, & \text{ha } 0 \leq x \leq b \\ 0, & \text{ha } x > b \end{cases} \quad (4.2.202)$$

és a részecske balról esik be a potenciálgátra. Legyen a részecske kinetikus energiája $x \rightarrow -\infty$ esetén $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Keressük a

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \quad (4.2.203)$$

Schrödinger-egyenlet

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \phi(x) \quad (4.2.204)$$

alakú stacionárius megoldását, amelyre

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \phi(x) = E \phi(x) \quad (4.2.205)$$

alakú stacionárius Schrödinger-egyenlet áll fenn. A megoldás alakja

$$\phi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx}, & \text{ha } x < 0 \\ C e^{\kappa x} + D e^{-\kappa x}, & \text{ha } 0 \leq x \leq b \\ F e^{ikx} + G e^{-ikx}, & \text{ha } b < x \end{cases}, \quad (4.2.206)$$

ahol

$$\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)} \quad (4.2.207)$$

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:

$$\begin{aligned} A + B &= C + D, \\ ik(A - B) &= \kappa(C - D), \\ C e^{\kappa b} + D e^{-\kappa b} &= F e^{ikb} + G e^{-ikb}, \\ \kappa(C e^{\kappa b} - D e^{-\kappa b}) &= ik(F e^{ikb} - G e^{-ikb}). \end{aligned} \quad (4.2.208)$$

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 $x \rightarrow -\infty$ ill. $x \rightarrow +\infty$ esetén csak kifutó részecskét (síkhullámot) látunk. Vegyük az utóbbi esetet, amikor tehát $G = 0$. A harmadik és negyedik folytonossági feltételből

$$C = \frac{F}{2\kappa} e^{ikb - \kappa b} (\kappa + ik), \quad D = \frac{F}{2\kappa} e^{ikb + \kappa b} (\kappa - ik), \quad (4.2.209)$$

míg az első két feltételi egyenletből

$$A = \frac{F}{4ik\kappa} e^{ikb} \left[e^{-\kappa b} (\kappa + ik)^2 - e^{\kappa b} (\kappa - ik)^2 \right], \quad B = \frac{F}{4ik\kappa} e^{ikb} (e^{\kappa b} - e^{-\kappa b}) (\kappa^2 + k^2) \quad (4.2.210)$$

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 abszolút értékét:

$$R = \left| \frac{j_R}{j_b} \right|, \quad T = \left| \frac{j_T}{j_b} \right|. \quad (4.2.211)$$

Mivel az egyes valószínűségi áramsűrűségek rendre:

$$\begin{aligned} j_b &= \frac{i\hbar}{2m} |A|^2 \left(e^{ikx} \frac{d}{dx} e^{-ikx} - e^{-ikx} \frac{d}{dx} e^{ikx} \right) = \frac{\hbar k}{m} |A|^2, \\ j_R &= -\frac{\hbar k}{m} |B|^2, \quad j_T = \frac{\hbar k}{m} |F|^2, \end{aligned} \quad (4.2.212)$$

ahol a teljes hullámra vonatkozó valószínűségi áram kontinuitása miatt:

$$j_b + j_R = j_T, \quad |A|^2 - |B|^2 = |F|^2. \quad (4.2.213)$$

Ezek figyelembevételével a keresett valószínűségek, azaz a visszaverődési és az áthaladási együttható:

$$\begin{aligned} R &= \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{|B|^2 + |F|^2}{|A|^2} - \frac{|F|^2}{|A|^2} = 1 - T, \\ T &= \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{16k^2 |\kappa|^2}{\left| e^{-\kappa b} (\kappa + ik)^2 - e^{\kappa b} (\kappa - ik)^2 \right|^2}, \end{aligned} \quad (4.2.214)$$

ahol $0 \leq T \leq 1$ és $0 \leq R \leq 1$. 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

$$T \approx \frac{16k^4(1 - \xi)}{16k^4(1 - \xi) + 4k^4\xi^2 \sin^2 kb} \approx 1 - \frac{1}{4}\xi^2 \sin^2 kb, \quad R = \frac{1}{4}\xi^2 \sin^2 kb. \quad (4.2.215)$$

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

$$T \approx \frac{16k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} e^{-2\kappa b} = T_0 \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} b \sqrt{2m(V_0 - E)}\right\} \quad (4.2.216)$$

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

$$T \approx T_0 \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_-}^{x_+} dx \sqrt{2m[V(x) - E]}\right\}, \quad (4.2.217)$$

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).

5 RÉSZECSEKERENDSZEREK

A részecskerendszerek kvantummechanikája bár rendkívül gazdag és szerteágazó, mind a szóba jöhető fizikai rendszereket, mind pedig a rájuk vonatkozó Schrödinger-egyenlet megoldási módszereit illetően, elvi szempontból azokon az alapelveken nugszik, amelyekkel a pont részecskék vizsgálata során megismerkedtünk. Sok részecskéből álló fizikai rendszerek esetén van azonban még egy nagyon fontos elv, amely érvényesül, a **részecskeazonosság elve**. Ebben a fejezetben erről az elvről és általános következményeiről beszélünk. Természetesen egy fél éves 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. Ehelyett néhány olyan példát próbálok kiragadni, amelyeknek a kvantummechanika alapján történő megértése nagy mértékben igazolja 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. Egyrészt, az a tapasztalat, hogy ha részecskék relativisztikus energiákon kölcsönhatnak, akkor megsemmisülhetnek, ill. új részecskék keletkezhetnek. Ez nem fér bele a kvantummechanika keretei közé. Láttuk, hogy a kvantummechanikában feltesszük, hogy a hullámfüggvény normája időben állandó. Ez jelenti azt fizikailag, hogy a részecskék számának egy (zárt) kvantummechanikai rendszeren belül meg kell maradnia. A kvantummechanikának a relativisztikus általánosítása nem bizonyult ellentmondás mentesen véghez vihetőnek. Az ilyen irányú próbálkozások azonban elvezettek a kvantumtérelmélet megszületéséhez, amelyben sikerült a kvantummechanika és a speciális relativitás elmélete elveinek az ötvözése. Más oldalról, az sem nyilvánvaló, hogy a kvantummechanika érvényes-e változatlan formában, vagy pedig általánosítható-ekézenfekvő módon arra az esetre, amikor gravitációs tér van jelen.

5.0.12 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 módszerrel nem lehet megjelölni ezeket, hogy melyik az 1-es, 2-es, stb. részecske. Csak annyit lehet tudni, hogy hány darab azonos részecske van a rendszerben, de nem lehet őket „címkevel”, „sorszámossal”, stb. ellátni. Az egyes részecskéknél nincsen jól definiált pályájuk, így ennek révén sem lehet különbséget tenni közöttük, ha azonosak.

Az elektronok Coulomb-szórásának szórás 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. A közöttük levő Coulomb-kölcsönhatás miatt a két elektron szóródik egymáson. Amikor hullámcsomagjaik ismét messzire eltávolodnak egymástól, akkor újra két elektront fogunk látni, amelyek impulzusának várható értéke a TKP rendszerben azonos nagyságú, ellentétes irányú. Azt azonban nem tudjuk semmilyen módon eldönteni, hogy ezek közül melyik az az elektron, amelyik „balról” és melyik, amelyik „jobbról” indult el eredetileg. Ezért a θ és a $\pi - \theta$ szöggel való szóródás differenciális hatáskeresztmetszetének meg kell egyeznie, hiszen a két elektron felcserélése a végállapotban annak felel meg, hogy a szórási szög θ -ról $\pi - \theta$ -ra változik. A differenciális szórási hatáskeresztmetszet viszont a megfelelő szórási amplitudó abszolút értékének a négyzete. Ezért az $f(\theta)$ és az $f(\pi - \theta)$ szórási amplitudó csak egy egységnyi abszolút értékű komplex fázisban különbözhet egymástól:

$$f(\pi - \theta) = e^{i\alpha} f(\theta), \quad (5.0.1)$$

ahol $\alpha \in [0, 2\pi]$ valós. Ráadásul, ha a két elektront felcseréljük, majd újra felcseréljük, akkor vissza kell kapjunk 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. A tapasztalat az, hogy két elektron szórási amplitudója antiszimmetrikus az elektronok felcserélésével szemben. Képzeljük el, hogy $f_d(\theta)$, 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 $f_{k.cs.}(\theta) = f_d(\pi - \theta)$. A fentebb elmondottak alapján a két amplitudó interferál és interferenciájukra elvileg csak kétféle lehetőség van: $f(\theta) \propto f_d(\theta) \pm f_d(\pi - \theta)$. **Az elektronok Coulomb-szórása esetén csak akkor kapunk a tapasztalattal egyező differenciális szórási hatáskeresztmetszetet, ha azt tételezzük fel, hogy a szórási amplitudó a két elektron felcserélésével szemben antiszimmetrikus:**

$$f(\theta) \propto f_d(\theta) - f_d(\pi - \theta) \quad (5.0.2)$$

Az antiszimmetrizálás eredménye abban mutatkozik meg, hogy amíg megkülönböztethető részecskék esetén a Coulomb-szórás differenciális hatáskeresztmetszetének, az ún. Rutherford-féle szórási hatáskeresztmetszetnek az előre szórásnál ($\theta = 0$) van maximuma és szigorúan monoton csökken a növekvő szórási szöggel, addig az azonos elektronok esetén a differenciális szórási hatáskeresztmetszet a θ szög függvényében $\theta = \frac{1}{2}\pi$ -re nézve tükörszimmetrikus és $\theta = 0$ és π esetén maximuma, $\theta = \frac{1}{2}\pi$ esetén minimuma van.

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 ($i = 1, 2, \dots, N$) az i -edik részecske összes szabadsági fokait, azaz legyen $x_i = (\vec{r}_i, \sigma_i, \dots)$ 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 változatlanok kell maradnia. Többek között annak a valószínűsége sem változhat meg, hogy egy részecskét x_j egy másikat x_k adatokkal találunk a rendszerben, ezért teljesülnie kell a

$$|\psi(\dots, x_j, \dots, x_k, \dots)|^2 = |\psi(\dots, x_k, \dots, x_j, \dots)|^2 \quad (5.0.3)$$

egyenlőségnek a rendszer $\psi(x_1, \dots, x_N)$ hullámfüggvényére. Ez azonban azt jelenti, hogy tetszőlegesen két részecske felcserélése esetén a hullámfüggvény legfeljebb egy egységnyi abszolút értékű komplex számmal szorozódhat:

$$\psi(\dots, x_k, \dots, x_j, \dots) = e^{i\alpha} \psi(\dots, x_j, \dots, x_k, \dots), \quad (5.0.4)$$

ahol $\alpha \in [0, 2\pi]$ valós szám. Ha most még egyszer felcseréljük a két részecskét, akkor vissza kell kapjunk az eredeti hullámfüggvényt²⁸. Ugyanazon két részecske újabb felcserélése azt jelenti, hogy a hullámfüggvény újabb $e^{i\alpha}$ fázisfaktort szorozódik,

$$\begin{aligned} \psi(\dots, x_j, \dots, x_k, \dots) &= e^{i\alpha} \psi(\dots, x_k, \dots, x_j, \dots) \\ &= e^{2i\alpha} \psi(\dots, x_j, \dots, x_k, \dots), \end{aligned} \quad (5.0.5)$$

ahonnan

$$e^{2i\alpha} = 1, \quad \implies \quad e^{i\alpha} = \pm 1 \quad (5.0.6)$$

adódik. Ez pontosan azt jelenti, hogy a hullámfüggvény tetszőleges két részecske felcserélésével szemben vagy szimmetrikus, vagy antiszimmetrikus lehet.

Bozonok és fermionok. **A Természetben a részecskéket két osztályba lehet sorolni aszerint, hogy milyen a spinjük. Az egész spinű, azaz az $s = 0, \hbar, 2\hbar, \dots$ spinű részecskéket bozonoknak, a feles spinű, azaz az $s = \frac{1}{2}\hbar, \frac{3}{2}\hbar, \dots$ 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 szimmetrikus, az azonos fermionok rendszerének hullámfüggvénye pedig antiszimmetrikus bármely két részecske felcserélésével szemben. Az azonos fermionokra vonatkozó utóbbi állítás a Pauli-elv.

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 $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$ 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 $\Psi(x_1, \dots, x_N)$ hullámfüggvénye bármely két részecske felcserélésével szemben

²⁸Az alapfeltevésünk a kvantummechanikában, hogy a hullámfüggvény egyértékű függvényként létezik

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

$$\psi_{\nu_1, \dots, \nu_N}(x_1, \dots, x_N) \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \varphi_{\nu_1}(x_1) & \varphi_{\nu_1}(x_2) & \cdots & \varphi_{\nu_1}(x_N) \\ \varphi_{\nu_2}(x_1) & \varphi_{\nu_2}(x_2) & \cdots & \varphi_{\nu_2}(x_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_{\nu_N}(x_1) & \varphi_{\nu_N}(x_2) & \cdots & \varphi_{\nu_N}(x_N) \end{pmatrix} \quad (5.0.7)$$

determinánsok, az ún. **Slater-determinánsok**. 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 részecskekonfigurációk lineáris szuperpozíciója lehet, amikor minden részecske más egy-részecske állapotban van. **A Pauli-elv azt mondja ki, hogy azonos fermionok rendszerében bármely egy-részecskés állapot legfeljebb csak a 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, $n_\nu = 0, 1, 2, \dots$ részecske is betölthet.

A további fejezetekben a részecskeazonosság néhány következményével foglalkozunk.

5.0.13 Atomok Mengyelejev-féle periodusos rendszere

Az elemeket Mengyelejev (1869) kémiai tulajdonságaik alapján, empirikus 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 elektronehéjak 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 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:

$$\hat{H} = \sum_{a=1}^Z \left[-\frac{\hbar^2 \Delta_{\vec{r}_a}}{2m_e} - \frac{Ze^2}{|\vec{r}_a|} \right] + \frac{1}{2} \sum_{a,b=1}^Z \frac{e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_b|}, \quad (5.0.8)$$

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 energiája²⁹. 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 energiasajátértékéhez tartozik. A feladatot az elektronok közötti kölcsönhatás teszi bonyolulttá. Ezért a feladatot, a H-atom esetét kivéve, nem lehet közelítések nélkül megoldani. A jelen előadás keretében nem vállalkozhatunk 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 olvasható bele az átlagos potenciálba, már csak gyenge, ún. maradék-kölcsönhatás. Ha a maradék-kölcsönhatást elhanyagoljuk, akkor a centrális potenciálban szokásos n fő- és ℓ mellékvantumszámokkal 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 beállítását is figyelembe véve, $2(2\ell + 1)$ darab elektron-állapot 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 rendszám szerint haladva, csoportokat alkotnak. Az egyes csoportokban rendre az alábbi pályák állapotai töltődnek fel:

²⁹Azzal a közelítéssel élünk, hogy az atom tömegközéppontja és az atommag egybe esik, és ezt a pontot választottuk a koordináta-rendszerünk origójának

| Elektron-héj | Állapotok száma |
|--------------------|-----------------|
| $1s$ | 2 |
| $2s, 2p$ | 8 |
| $3s, 3p$ | 8 |
| $4s, 3d, 4p$ | 18 |
| $5s, 4d, 5p$ | 18 |
| $6s, 4f, 5d, 6p$ | 32 |
| $7s, 6d, 5f \dots$ | |

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 periódus 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.

5.0.14 Ideális gázok alacsony hőmérsékleten

5.0.15 Összefonódott állapotok

5.0.16 Bose-kondenzátumok interferenciája

6 KITEKINTÉS

6.1 A Feynman-féle pályaintegrálos kvantálás

6.2 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 elektromágneses állóhullámok lineáris kombinációjaként írható le. Az elektromágneses állóhullámokat a \vec{k} hullámvektoruk jellemzi. Ennek értéke az üreg határára kirótt határfeltételek³⁰ miatt csak diszkrét értékeket vehet fel, mégpedig olyan módon, hogy téglalatest alakú üregben valamennyi, L_j ($j = 1, 2, 3$) hosszúságú élre a hullámvektor megfelelő k_j ($j = 1, 2, 3$) Descartes³¹-komponenséből számolt $\frac{1}{2}\lambda_j = \frac{\pi}{k_j}$ félhullámhossz $n_j = 0, 1, 2, 3, \dots$ egész számszor férjen rá, $n_j \frac{1}{2}\lambda_j = L_j$

$$k_j = \frac{\pi}{L_j} n_j; \quad (\text{A.1})$$

(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:

$$\vec{k} = \frac{\pi}{L} (n_x, n_y, n_z). \quad (\text{A.2})$$

Minden \vec{k} hullámvektorral jellemzett állóhullám két független, egymásra merőleges rezgés szuperpozíciója, mert az elektromos térerősség merőleges a hullámvektorra és

³⁰A határfeltétel az, hogy az elektromos térerősség érintőirányú komponense, ill. a mágneses indukció normális irányú komponense zérus a vezető üregének felületén.

³¹René Cartesius Descartes (1596-1650, francia) filozófus, fizikus és matematikus. Nevéhez fűződik a fénytörés törvénye, a Snellius-Descartes-törvény. Fizikai világgépének 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. Jelöljük az \vec{e}_k^α ($\alpha = 1, 2$) egységvektorok a \vec{k} hullámvektorra merőleges síkban a két, független, merőleges irányt, akkor a \vec{k} hullámvektorhoz tartozó állóhullám:

$$\vec{E}_k(\vec{r}, t) = \sum_{\alpha=1,2} \vec{e}_k^\alpha E_k^\alpha(\vec{r}, t). \quad (\text{A.3})$$

A teljes elektromágneses mező az üregben ilyen állóhullámú módusok szuperpozíciója:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \sum_{n_x, n_y, n_z} \vec{E}_k(\vec{r}, t) = \sum_{n_x, n_y, n_z} \sum_{\alpha=1,2} \vec{e}_k^\alpha E_k^\alpha(\vec{r}, t). \quad (\text{A.4})$$

A Maxwell-egyenletek következménye, hogy ezek a módusok lineáris harmonikus oszcillátorok, mert a

$$\frac{\partial^2 E_k^\alpha(\vec{r}, t)}{\partial t^2} + \omega_k^2 E_k^\alpha(\vec{r}, t) = 0 \quad (\text{A.5})$$

egyenletnek tesznek eleget, ahol

$$\omega_k^2 = c^2 \vec{k}^2 \quad (\text{A.6})$$

a módus körfrekvenciájának a négyzete. A klasszikus elektrodinamika keretében azt is be lehet látni, hogy az elektromágneses mező energiasűrűsége az egyes állóhullámú módusok energiasűrűségeinek az összege:

$$u = \frac{1}{4\pi} \vec{E}^2 = \sum_{n_x, n_y, n_z} \sum_{\alpha=1,2} \frac{1}{4\pi} (E_k^\alpha)^2 \quad (\text{A.7})$$

Ez azt jelenti, hogy az elektromágneses 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 $n = 0, 1, 2, \dots$ egész szám, ϵ_0 -al pedig a számolás végén nullához fogunk tartani. Boltzmanntól³² származik annak a felismerése, hogy egy részecske, egy oszcillátor, ha egyensúlyban van a T hőmérsékeltű környezettel, akkor

$$w_n = \frac{e^{-\frac{\epsilon_n}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\epsilon_n}{k_B T}}} \quad (\text{A.8})$$

³²Ludwig Boltzmann (1844-1906, osztrák) fizikus. Kísérletileg igazolta a Maxwell-elmélet által megkövetelt kapcsolatot a fény örsmutatója, 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-sugárzásra vonatkozó Stefan-Boltzmann-törvény elméleti megalapozása.

valószínűséggel tölti be az ϵ_n energiájú állapotát. Ha ez így van, akkor egy oszcillátor átlagos energiája

$$\bar{\epsilon} = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n w_n = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n e^{\frac{-\epsilon_n}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{\frac{-\epsilon_n}{k_B T}}}. \quad (\text{A.9})$$

Ennek kiszámolásához induljunk ki a mértani sor

$$\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \quad (\text{A.10})$$

képletéből és deriváljuk azt az x kvóciens szerint:

$$\frac{1}{(1-x)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} n x^{n-1}. \quad (\text{A.11})$$

Vegyük ezeket a sorokat $x = e^{\frac{-\epsilon_0}{k_B T}}$ helyettesítéssel, akkor

$$\bar{\epsilon} = \epsilon_0 \frac{\frac{1}{(1-x)^2}}{\frac{1}{1-x}} x = \frac{\epsilon_0 e^{\frac{-\epsilon_0}{k_B T}}}{1 - e^{\frac{-\epsilon_0}{k_B T}}} = \frac{\epsilon_0}{e^{\frac{\epsilon_0}{k_B T}} - 1} \xrightarrow{\epsilon_0 \rightarrow 0} k_B T \quad (\text{A.12})$$

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

$$N_\omega = \frac{4\pi R^3}{3} = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{L}{\pi c} \right)^3 \omega^3. \quad (\text{A.13})$$

Innen deriválással adódik, hogy az $(\omega, \omega + d\omega)$ infinitezimális intervallumban található módusok száma,

$$dN_\omega \equiv g_\omega d\omega = 4\pi \left(\frac{L}{\pi c} \right)^3 \omega^2 d\omega \quad (\text{A.14})$$

növekvő körfrekvenciával négyzetesen nő. Itt g_ω az ún. állapotossűrűség, 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,

$$u = \frac{1}{L^3} k_B T \int_0^\infty g_\omega d\omega \rightarrow \infty, \quad (\text{A.15})$$

végtelen nagynak adódik. Ez az ún. **Rayleigh³³-Jeans³⁴-féle ultraibolya katasztrófa**. Ha ez igaz lenne, akkor a feketetest üregéből végtelen nagy energia lenne kinyerhető.

Planck³⁵ jött rá, hogy a fenti megfontolást csupán egy ponton módosítva el lehet érni, hogy növekvő frekvenciával a módusok átlagos energiája sokkal kisebb legyen mint $k_B T$, 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, $\epsilon_n = n\epsilon_0$, ($n = 0, 1, 2, \dots$). Valóban, ekkor a fenti számolás változatlan, csupán nem szabad az $\epsilon_0 \rightarrow 0$ határértéket venni. A T hőmérsékeltű környezetével termikus egyensúlyban lévő, ω körfrekvenciájú oszcillátor átlagos energiája**

$$\bar{\epsilon}_k = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}. \quad (\text{A.16})$$

Ez az átlagos energia alacsony frekvenciájú módusok esetén, azaz ha $\frac{\hbar\omega}{k_B T} \ll 1$, közelítőleg $\bar{\epsilon}_k \approx k_B T$, vagyis annyi mint amennyit a klasszikus fizika alapján kapnánk. Ugyanakkor a nagyfrekvenciás, ún. ultraibolya módusok átlagos energiája, amelyekre $\frac{\hbar\omega}{k_B T} \gg 1$, közelítőleg

$$\bar{\epsilon}_k \approx \hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}, \quad (\text{A.17})$$

ami növekvő körfrekvenciával exponenciálisan csökken. Az $(\omega, \omega + d\omega)$ infintezimális intervallumban található módusok az energiasűrűséghez tehát

$$du = \frac{1}{L^3} g_\omega \bar{\epsilon}_k d\omega = \frac{1}{L^3} \frac{\hbar\omega g_\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} d\omega \equiv \rho(\omega) d\omega \quad (\text{A.18})$$

járulékot adnak. Az összes módus együttes járuléka tehát az energiasűrűséghez

$$\begin{aligned} u &= \int_0^\infty \frac{1}{L^3} g_\omega \bar{\epsilon}_k d\omega \\ &= 4\pi \left(\frac{1}{\pi c}\right)^3 \int_0^\infty \frac{\hbar\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} d\omega = \text{const.} T^4 < \infty \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

véges érték, amely arányos a hőmérséklet negyedik hatványával. Ez a feketetest sugárzásának Stefan³⁶-Boltzmann-féle törvénye. A kísérletek nemcsak ezt, hanem a Planck-féle sugárzási törvényt,

$$\rho(\omega) d\omega = 4\pi \left(\frac{1}{\pi c}\right)^3 \frac{\hbar\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} d\omega \quad (\text{A.20})$$

is fényesen igazolják. Utóbbi az egységnyi körfrekvencia-intervallumban adja meg az energia sűrűségét a feketetest-sugárzásban. Végül a Wien³⁷-féle eltolódási törvény

³³Lord (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.

³⁴Sir James Hopwood Jeans (1877-1946, angol) matematikus, fizikus, csillagász.

³⁵Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858-1947, német) 1918-ban fizikai Nobel-díjat kapott a Fizika fejlődéséért az energiakvantum felfedezésével tett szolgálataiért.

³⁶Joseph Stefan (1835-1893, osztrák) fizikus, a kinetikus gázelmélet egyik megalapozója.

³⁷Wilhelm Carl Werner Otto Fritz Franz Wien (1864-1928, német) 1911-ben fizikai Nobel-díjat kapott a hősugárzás törvényeivel kapcsolatos felfedezése miatt.

is kiolvasható belőle, ha megkeressük, hol van a $\rho(\omega)$ függvény maximuma. Az az ω_m körfrekvencia, amelyhez tartozó módusok maximálisan járlna hozzá az energiasűrűséghez, azaz amely frekvencián maximális a feketetest sugárzásának $c\rho(\omega)$ intenzitása, arányos a feketetest hőmérsékletével, azaz $\frac{\hbar\omega_m}{k_B T} = \text{áll}$.

A kvantummechanika szempontjából a feketetest 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 megfigyelések³⁸ 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, $T = 2,7 \text{ K}$ 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” méreteken, lokálisan vannak pl. csillagok, feketelyukak közelében.

2. **A fotoeffektus. A fényelektromos jelenség, idegen nevén a fotoeffektus lényege, hogy a fémek felületét fénnel megvilágítva a fémből elektronok lépnek ki.** A fényelektromos jelenséget Lénárd Fülöp³⁹ 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,

$$h\nu = E + W, \quad (\text{A.21})$$

³⁸Arno 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.

³⁹Philipp Eduard Anton von Lenard (1862-1947, magyar-német) a katódsugarak kutatásáért 1905-ben fizikai Nobel-díjat kapott.

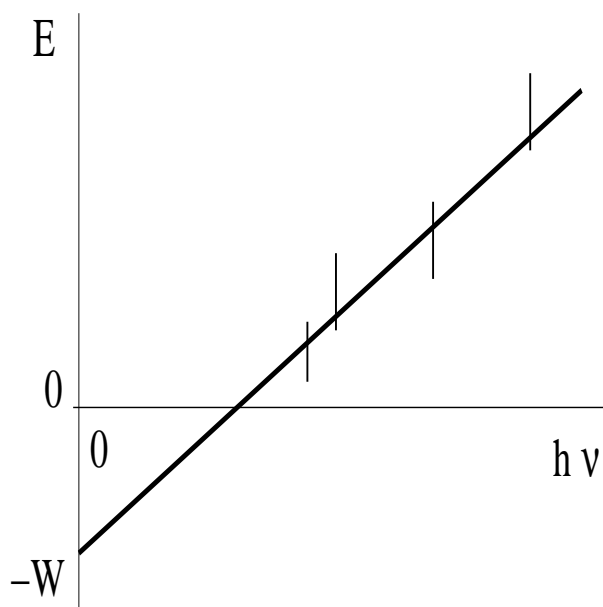


Figure 2: Fotoeffektus során kilépő elektronok kinetikus energiája a monokromatikus besugárzó fény frekvenciájának függvényében.

ahol W az adott fémre jellemző állandó. A Einstein⁴⁰ 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 Röntgen⁴¹-sugárzás szóródik atomon, akkor frekvenciaeltolódást figyelhetünk meg, amelynek értéke függ a szórási szögtől. Ez a Compton⁴²-szórás jelensége, amelyet Compton fedezett fel és Compton és

⁴⁰Albert Einstein (1879-1955, német-amerikai) 1921-ben fizikai Nobel-díjat kapott az Elméleti Fizika terén kifejtett szolgálataiért, különös tekintettel a fotoeffektus törvényének felfedezésére.

⁴¹Wilhelm 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.

⁴²Arthur Holly Compton (1892-1962, amerikai) 1927-ben megosztott Nobel-díjat kapott a róla elnevezett szórási jelenség felfedezéséért. A fizikai Nobel-díj másik 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.

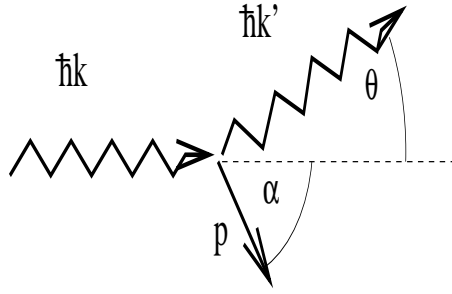


Figure 3: A Compton-szórás sematikus ábrája.

Debye⁴³ a foton fogalmának segítségével értelmezték.

A kísérletben azért használunk Röntgen-sugárzást, hogy az atomi elektront kezdetben nyugalomban levő, szabad elektronnak lehessen tekinteni. Esszen \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

Röntgen-sugárzás szórási szöge θ , az elektron \vec{p} impulzusának a \vec{k} hullámvektorral bezárt szöge α (lásd 3. 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:

$$\begin{aligned}\hbar\omega + m_e c^2 &= \hbar\omega' + \frac{m_e c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \\ \hbar\vec{k} &= \hbar\vec{k}' + \frac{m_e \vec{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}.\end{aligned}\tag{A.22}$$

Bontsuk az impulzusokat a bejövő \vec{k} iránnyal párhuzamos és arra merőleges komponensekre:

$$\begin{aligned}\hbar\frac{\omega}{c} &= \hbar\frac{\omega'}{c} \cos \theta + \frac{m_e v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \cos \alpha, \\ 0 &= \hbar\frac{\omega'}{c} \sin \theta - \frac{m_e v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \sin \alpha.\end{aligned}\tag{A.23}$$

A második egyenlet segítségével tüntessük el α -t az első egyenletből:

$$\left(\hbar\frac{\omega}{c} - \hbar\frac{\omega'}{c} \cos \theta\right)^2 + \left(\hbar\frac{\omega'}{c} \sin \theta\right)^2 = \left(\frac{m_e v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}\right)^2,$$

⁴³Petrus 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.

$$\begin{aligned} \left(\hbar\frac{\omega}{c}\right)^2 + \left(\hbar\frac{\omega'}{c}\right)^2 - 2\hbar\frac{\omega}{c}\hbar\frac{\omega'}{c}\cos\theta &= \left(\frac{m_e v}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\right)^2, \\ \left(\hbar\frac{\omega}{c} - \hbar\frac{\omega'}{c}\right)^2 + 4\hbar\frac{\omega}{c}\hbar\frac{\omega'}{c}\sin^2\frac{\theta}{2} &= \left(\frac{m_e v}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\right)^2. \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

Végül az energiamegmaradás törvényének segítségével tüntessük el az elektron v sebességét:

$$\begin{aligned} \left(\frac{m_e v}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\right)^2 c^2 &= \left(\frac{m_e c^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\right)^2 - m_e^2 c^4 \\ &= \left(\hbar\omega - \hbar\omega' + m_e c^2\right)^2 - m_e^2 c^4 \\ &= \left(\hbar\omega - \hbar\omega'\right)^2 + 2\left(\hbar\omega - \hbar\omega'\right)m_e c^2, \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

úgyhogy

$$\begin{aligned} \left(\hbar\omega - \hbar\omega'\right)^2 + 4\hbar^2\omega\omega'\sin^2\frac{\theta}{2} &= \left(\hbar\omega - \hbar\omega'\right)^2 + 2\left(\hbar\omega - \hbar\omega'\right)m_e c^2, \\ \omega - \omega' &= \frac{2\hbar}{m_e c^2}\omega\omega'\sin^2\frac{\theta}{2} \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

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:

$$\lambda' - \lambda = 4\pi\frac{\hbar}{m_e c}\sin^2\frac{\theta}{2}. \quad (\text{A.27})$$

Az itt fellépő

$$\lambda_c = \frac{2\pi\hbar}{m_e c} = \frac{h}{m_e c} \quad (\text{A.28})$$

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-törvénynek⁴⁴. Alacsony hőmérsékleten azonban a szilárdtestek fajhője nem független a hőmérséklettől, hanem $c_p \propto T^3$ hőmérséklet-függést mutat (ld. 4. ábra).

⁴⁴Pierre Louis Dulong (1785-1838, francia) fizikus és Alexis Thérèse 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

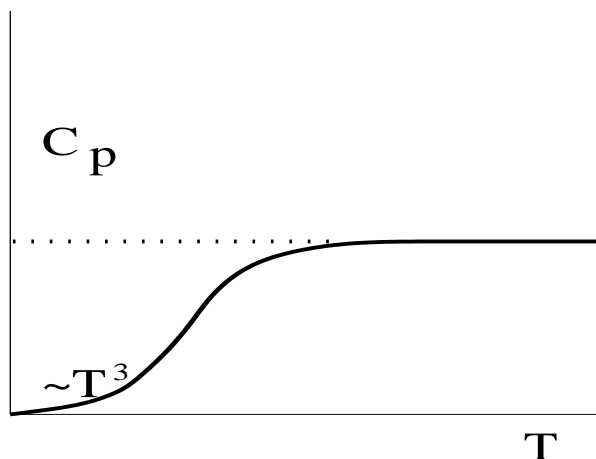


Figure 4: Szilárdtestek fajhőjének hőmérséklet-függése.

A szilárdtestek alacsony hőmérsékleti fajhőjének hőmérséklet-függését azon feltevés alapján sikerült megérteni, hogy a fémek alkotó kristályrács kollektív rugalmas kisrezgéseit, 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.

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 pont részecskékre vonatkozó Einstein-féle energia, impulzus és nyugalmi tömeg közötti összefüggést kielégítő részecske interferenciára képes önmagával.

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 $k_B T$. 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 abszolút értéke nem lehet nagyobb mint $\mathcal{O}(\frac{2\pi}{a})$, ahol a a rácsállandó. A rezgőrendszer teljes energiája $E = \text{módusok száma} \cdot k_B T$, ahonnan a fajhő

$$c_p = \frac{1}{V} \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{1}{V} \text{módusok száma} \cdot k_B, \quad (\text{A.29})$$

ami független a hőmérséklettől. Ez a Dulong-Petit-törvény.

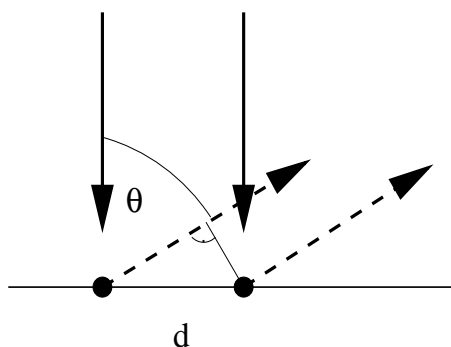


Figure 5: A Davisson-Germer-kísérlet sematikus ábrája.

1. *Davisson és Germer kísérlete.* A Davisson⁴⁵-Germer⁴⁶-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 amelyet 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. 5. ábra). Két, szomszédos atom által szórt hullám útkülönbsége $d \sin \theta$, ha a beesési merőlegeshez képest θ szög alatt szórt hullámot nézzük. Az elhajlási képen azokban a θ_n irányokban kapunk intenzitás-maximumot, amelyekre a

$$d \sin \theta_n = n \lambda \quad (\text{A.30})$$

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

$$d \sin \theta_n = n \frac{h}{p}. \quad (\text{A.31})$$

Ebből arra lehet következtetni, hogy a p impulzusú elektron ebben a kísérletben ugyanúgy viselkedik, mintha $\lambda = h/p$ hullámhosszú klasszikus hullám lenne.

2. *Thomson kísérlete.* Thomson⁴⁷ megmutatta, hogy a Debye-Scherrer⁴⁸-módszerben adott impulzusú elektronnyalábot alkalmazva monokromatikus Röntgen-

⁴⁵Az 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).

⁴⁶Lester Halbert Germer (1896-1971, amerikai) fizikus Davissonnal együtt bebizonyította az anyag részecske-hullám dualitását, ami alapvető jelentőségű volt az elektronmikroszkóp kifejlesztése szempontjából.

⁴⁷Sir 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.

⁴⁸Paul Scherrer (1890-1969, svájci) fizikus, aki azokkal a kutatásaival vált nemzetközileg elismertté, amelyeket a Röntgen-sugárzásnak kristályokon, folyadékokon gázokon való szórátása terén végzett.

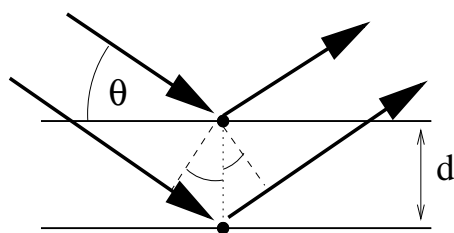


Figure 6: Segédábra a Bragg-feltétel megfogalmazásához.

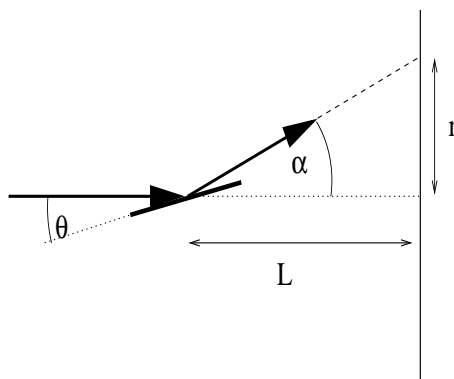


Figure 7: A Debye-Scherrer-módszer sematikus ábrája.

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' íkhullámnak két szomszédos, egymástól d távolságra levő, párhuzamos kristálysíkról visszavert része találkozik, akkor közöttük $2d \sin \theta$ útkülönbség van, ahol θ a beeső nyáláb és a kristálysíkok szöge. Amikor ezzel az állandó útkülönbséggel a két síkról visszavert s' íkhullám szuperponálódik, akkor intenzitás-maximumot a **Wulf**⁴⁹ és **Bragg**⁵⁰-féle feltétel teljesülése esetén kapunk,

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (\text{A.32})$$

ahol λ a hullámhossz és $n = 1, 2, \dots$ (ld. 6. 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 nyáláb tengelyétől radiális irányban kifelé haladva a nyálábra merőleges megfigyelési síkban. Legyen a megfigyelési sík a mintától L távolságra,

⁴⁹Theodor Wulf (1868-1946, német) fizikus és jezsuita páter, aki a saját maga által tervezett és épített elektrométerrel 1910-ben felfedezte a kozmikus sugárzást.

⁵⁰Sir 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.

és nézzük az intenzitást a beeső nyaláb tengelyétől r távolságra. Itt a $\text{tg } \alpha = r/L$ 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,

$$2d \frac{r_n}{2L} = n\lambda, \quad \implies \quad r_n = n\lambda \frac{L}{d} \quad (\text{A.33})$$

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 Broglie⁵¹ 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 jötték 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 Balmer⁵²-sorozat.* A sorozatba-rendezés azon alapul, hogy minden észlelt sugárzási frekvenciát elő lehet állítani olyan, szigorúan monoton csökkenő szám-sorozat tagjainak különbségeiként, ún. termék különbségeiként, ahol a sorozat tagjai meghatározott törvényszerűség szerint csökkennek, pl. a hidrogén-atom Balmer-sorozata esetén $\frac{1}{n^2}$ szerint, ahol $n = 1, 2, 3, \dots$

A Ritz⁵³-féle kombinációs elv azt mondta ki, hogy ismert spektrumvonalak energiáinak összeadása és kivonása révén újabb spektrumvonalakat lehet kombinálni. Az elv a gyakorlatban hasznosnak bizonyult újabb spektrumvonalak keresésében: meg lehetett előre mondani, hogy milyen frekvenciáknál várható 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 ger-

⁵¹Prince Louis-Victor Pierre Raymond de Broglie (1892-1987, francia) az 1929. évi fizikai Nobel-díj kitüntetéttje, a díjat az elektronok hullámtermészetének felfedezéséért kapta.

⁵²Johann Jacob Balmer (1825-1898, svájci) matematikus és fizikus a spektrumvonalak rendszerezése terén a kvantummechanika kifejlődése szempontjából alapvető fontosságú felismerést tett.

⁵³Walter 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.

jesztett állapotából az alacsonyabban gerjesztett $E_n < E_m$ energiájú állapotába megy át; ekkor

$$\hbar\omega_{n,m} = E_m - E_n. \quad (\text{A.34})$$

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**⁵⁴-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:

$$n\frac{h}{p} = 2r\pi, \quad (\text{A.35})$$

ahol p az elektron impulzusának nagysága, r a körpálya sugara. Másrészt a Coulomb⁵⁵-erőnek kell biztosítania, hogy az elektron körpályán maradjon:

$$m\frac{v^2}{r} = m\frac{p^2}{m^2r} = \frac{p^2}{mr} = \frac{Ze^2}{r^2}, \quad (\text{A.36})$$

ahol m , ill. e az elektron nyugalmi tömege, ill. töltése, Z az atom rendszáma. Így

$$p = \frac{n\hbar}{r}, \quad p^2 = \frac{mZe^2}{r}, \quad (\text{A.37})$$

ahonnan az elektron impulzusa, az elektron pályájának sugara és az elektron energiája diszkrétnek adódik:

$$\begin{aligned} p_n &= \frac{mZe^2}{n\hbar}, \\ r_n &= \frac{n^2\hbar^2}{mZe^2}, \\ E_n &= -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{r_n} = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2} \equiv -R\frac{1}{n^2}. \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

Itt R az ún. Rydberg⁵⁶-állandó. Az atomi spektrumvonalak olyan elektromágneses sugárzást jelentenek, ami akkor következik be, amikor az elektron egy magasabb

⁵⁴Niels 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.

⁵⁵Charles Auguste de Coulomb (1736-1806, francia) fizikus méréseivel igazolta a róla elnevezett Coulomb-törvényt.

⁵⁶Johannes Robert Rydberg (1854-1919, svéd) fizikus vezette be a termék fogalmát.

energiaszintről alacsonyabb energiaszintre kerül. Az energiakülönbség úgy jelenik meg, mint a kibocsátott sugárzás energiakvantuma:

$$\hbar\omega = E_{n'} - E_n = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right), \quad n' > n. \quad (\text{A.39})$$

Ez a modell helyesen magyarázta a H-atom színeképvonalait, nem adott azonban helyes magyarázatot a bonyolultabb atomok színeképvonalaira.

2. *A Franck-Hertz kísérlet. A Franck és Hertz⁵⁷ által végzett kísérlet annak közvetlen bizonyítására szolgál, hogy az atomok diszkrét energiaadagokkal gerjeszthetők, azaz hogy az atomi állapotok energiái diszkréték.*

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 energiavesztés 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 elektronok 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 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 impulzuszóránykvantáltságát igazoló kísérletekről beszélünk.

⁵⁷Az 1925. évi fizikai Nobel-díjat visszatartották és 1926-ban megosztva ítelték oda James Francknak (1882-1964, német-amerikai) és Gustav Ludwig Hertznek (1887-1975, német) azoknak a törvényeknek a felfedezéséért, amelyek az elektronnak az atommal történő ütközését meghatározzák.

1. *A Stern és Gerlach kísérlete.* Stern⁵⁸ és Gerlach⁵⁹ 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 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 mágnespókat 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 Haas⁶⁰-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 faktorial

⁵⁸Az 1943. évi fizikai Nobel-díjat visszatartották és 1944-ben ítélték oda 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.

⁵⁹Walther 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.

⁶⁰Wander 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.

különbözik a mágneses momentum és az impulzusmomentum arányossági tényezője.

A kísérletben egy ferromágneses hengert vettek, amelyet torziós szálon függőlegesen felfüggesztettek a hossz tengelye, 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. A homogén mágneses térben valamennyi mágneses momentum beállt a potenciális energia minimumát jelentő, a külső mágneses térrel ellentétes irányba. Ha a mágneses momentumokhoz impulzusmomentum is tartozik, akkor a kísérletben az eredetileg rendezetlenül álló pörgettyűk befordulnak ugyanabba az irányba és így kezdeti, eredő zérus impulzusmomentumuk nem nulla eredő impulzusmomentummá adódik össze. Az impulzusmomentum megmaradásának következtében ezért a hengernek, mint egésznek el kell fordulnia a függőleges tengely körül. Valóban észlelték ezt az elfordulást, és a torziós szál torziós állandójának és a szögelfordulás mértékének ismeretében meg tudták határozni az elektron által hordozott impulzusmomentum és mágneses momentum nagyságának az arányát.

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 egy kettes faktor erejéig.

Az elektron így megfigyelt mágneses momentuma tehát nem pályaimpulzusmomentummal kapcsolatos.

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*
2. *A periódusos rendszer felépítése és az elemek kémiai tulajdonságai.*
3. *Rabi-oszcilláció.*
4. *Összefonódott spinállapotú elektronok ill. fotonok*
5. *Bose-kondenzátumok interferenciája.*

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 $N \rightarrow \infty$ határesetben létezik a relatív gyakoriság határértéke,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_k}{N} = w_k, \quad (\text{B.40})$$

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

$$\sum_k w_k = 1. \quad (\text{B.41})$$

Ne felejtjük 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 $N^{[1]}$, $N^{[2]} > N^{[1]}$, ..., $N^{[M]} > N^{[M-1]}$ 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 ugyanannyi, $N \gg 1$ a kísérletek száma, és felveszi a fizikus azt a hisztogrammot, ami az egyes relatív gyakoriságoknak a kísérletsorozatokban történő bekövetkezési gyakoriságát ábrázolja. Ha azt találja, 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 $1, 2, \dots, 6$), 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:

$$\bar{x} = \sum_k w_k x_k. \quad (\text{B.42})$$

A várható érték tehát köznyelven szólva a véletlen változó átlagos értéke.

Az egyedi véletlen kísérletek eredményei azonban jobban vagy kevésbé k-lönbözhetnek a várható értéktől. Az átlagos eltérés jellemzésére vezetjük be a **szórásnégyzet** fogalmát, ami nem más, mint a véletlen változó értékének a várható értéktől való négyzetes eltéréseinek a várható értéke:

$$\Delta^2 x = \overline{(x - \bar{x})^2} = \sum_k w_k (x_k - \bar{x})^2. \quad (\text{B.43})$$

A definícióból rögtön következik, hogy a szórásnégyzet nem más, mint a véletlen változó négyzete várható értékének és a várható értéke négyzetének a különbsége:

$$\Delta^2 x = \overline{x^2} - (\bar{x})^2. \quad (\text{B.44})$$

A bizonyítás igen egyszerű:

$$\begin{aligned} \Delta^2 x &= \sum_k w_k [x_k - \bar{x}]^2 = \sum_k w_k [x_k^2 - 2x_k \bar{x} + (\bar{x})^2] = \overline{x^2} - 2\bar{x} \sum_k w_k x_k + (\bar{x})^2 \sum_k w_k \\ &= \overline{x^2} - 2(\bar{x})^2 + (\bar{x})^2 = \overline{x^2} - (\bar{x})^2. \end{aligned} \quad (\text{B.45})$$

Általában az x véletlen változó tetszőleges $f(x)$ függvénye is véletlenszerűen veszi fel az értékét, s ennek várható értéke

$$\overline{f(x)} = \sum_k w_k f(x_k), \quad (\text{B.46})$$

ill. szórásnégyzete

$$\Delta^2 f = \sum_k w_k [f(x_k) - \overline{f(x)}]^2. \quad (\text{B.47})$$

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 számegegyenesnek 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,

$$dw(x) = F(x+dx) - F(x). \quad (\text{B.48})$$

Ha az $F(x)$ eloszlásfüggvény differenciálható, (vagy legalább szakaszonként differenciálható), akkor (legalább szakaszonként) értelmezhetjük az úgynevezett $\rho(x)$ **valószínűségi sűrűség-függvényt** a

$$dw(x) = \rho(x)dx \quad (\text{B.49})$$

módon, úgyhogy **a valószínűségi sűrűség-függvény az eloszlás-függvény első deriváltja:**

$$\rho(x) = \frac{dF(x)}{dx}. \quad (\text{B.50})$$

Az eloszlás-függvény definíciójából következik, hogy az $F(x)$ függvény alulról és felülről korlátos,

$$0 \leq F(x) \leq 1, \quad (\text{B.51})$$

monoton növekvő és

$$F(-\infty) = 0, \quad F(+\infty) = 1, \quad (\text{B.52})$$

A valószínűségi sűrűség definíciójából következik, hogy nem negatív, $\rho(x) \geq 0$, integrálható és

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)dx = 1. \quad (\text{B.53})$$

Ha a folytonos véletlen változó csak az $[a, b]$ véges intervallumon 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 eloszlás-

's-függvény jobb-, ill. baloldali deriváltjával azonosíthatjuk. Az eloszlás-függvényt visszaállíthatjuk a valószínűségi sűrűség-függvényből,

$$F(x) = \int_{-\infty}^x \rho(x')dx'. \quad (\text{B.54})$$

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:

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} xdw(x) = \int_{-\infty}^{\infty} x\rho(x)dx. \quad (\text{B.55})$$

A szórásnégyzet definíciója:

$$\Delta^2 x = \overline{(x - \bar{x})^2} = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \bar{x})^2 \rho(x)dx. \quad (\text{B.56})$$

Most is érvényes az alábbi azonosság:

$$\Delta^2 x = \overline{x^2} - (\bar{x})^2 = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \rho(x)dx - \left(\int_{-\infty}^{\infty} x\rho(x)dx \right)^2. \quad (\text{B.57})$$

A folytonos x véletlen változó tetszőleges („kellően jó viselkedésű”) $f(x)$ függvényének a várható értéke

$$\bar{f} = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\rho(x)dx, \quad (\text{B.58})$$

ill. szórásnégyzete

$$\Delta^2 f = \int_{-\infty}^{\infty} [f(x) - \bar{f}]^2 \rho(x)dx. \quad (\text{B.59})$$

Az x diszkrét valószínűségi változó **egyenletesen oszlik el** az értékhalmozán, ha minden lehetséges x_k értéket azonos $w_k = w$ valószínűséggel vesz fel. Tegyük fel, hogy az értékhalmoz 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:

$$\rho(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha, } x \notin [a, b] \\ \frac{1}{L}, & \text{ha, } x \in [a, b] \end{cases} \quad (\text{B.60})$$

azaz az $[a, b]$ intervallumban állandó, az $[a, b]$ intervallumon kívül pedig zérus értéket vesz fel. Az eloszlás-függvény:

$$F(x) = \int_{-\infty}^x dx' \rho(x') = \begin{cases} 0, & \text{ha, } x < a \\ \frac{x-a}{L}, & \text{ha, } x \in [a, b] \\ 1, & \text{ha, } x > b \end{cases} \quad (\text{B.61})$$

Az x folytonos valószínűségi változót normális -, vagy Gauss-eloszlásúnak nevezzük, ha a sűrűség-függvénye egyre normált Gauss-függvény,

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}. \quad (\text{B.62})$$

Ennek az eloszlásnak két darab valós, folytonos paramétere van, $\sigma > 0$ és $x_0 \in (-\infty, +\infty)$. Az eloszlás függvény az úgynevezett **hiba-függvény**,

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{(x'-x_0)^2}{2\sigma^2}} dx' \quad (\text{B.63})$$

nem írható fel zárt alakban. Teljesül a sűrűség-függvényektől elvárt

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} dx = 1 \quad (\text{B.64})$$

feltétel (ld. a C. Függelék). A normális eloszlás két paraméterének közvetlen jelentése van. A normális eloszlású valószínűségi változó várható értéke

$$\bar{x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} dx = x_0, \quad (\text{B.65})$$

a szórásnégyzete pedig

$$\Delta^2 x = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} (x - x_0)^2 e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} dx = \sigma^2. \quad (\text{B.66})$$

A kifejezésekben szereplő 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

$$I(a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad (\text{C.67})$$

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 F síkra történő integrálást,

$$I^2(a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-ay^2} = \int_S dx dy e^{-a(x^2+y^2)} \quad (\text{C.68})$$

Hajtsunk végre integráltranszformációt, térjünk át az S síkon az (x, y) Descartes-koordinátákról az (r, φ) síkbeli polárkoordinátákra,

$$x = r \cos \varphi, \quad y = r \sin \varphi. \quad (\text{C.69})$$

A változó-transzformáció Jacobi-mátrixának determinánsa

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial \varphi} & \frac{\partial y}{\partial \varphi} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -r \sin \varphi & r \cos \varphi \end{vmatrix} = r \quad (\text{C.70})$$

úgyhogy az új változóiban az S síkra vett integrál

$$I^2(a) = \int_S |J| e^{-ar^2} dr d\varphi = \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\varphi r e^{-ar^2} = 2\pi \int_0^\infty dr r e^{-ar^2} \quad (\text{C.71})$$

Vegyük észre, hogy a jobb oldalon álló integrál integrandusa lényegében az e^{-ar^2} függvény r szerinti deriváltja,

$$I^2(a) = \frac{2\pi}{-2a} \int_0^\infty dr \frac{\partial e^{-ar^2}}{\partial r} = \frac{2\pi}{-2a} (-1) = \frac{\pi}{a}. \quad (\text{C.72})$$

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

$$I_{2n+1}(a) = \int_{-\infty}^\infty dx x^{2n+1} e^{-ax^2} = 0, \quad n \geq 0, \quad a > 0, \quad (\text{C.73})$$

hiszen az integrandus ilyenkor az x változó páratlan függvénye (az integrandus $x \rightarrow -x$ transzformáció során előjelet vált). Nyilvánvaló, hogy bármilyen páratlan $f(-x) = -f(x)$ függvényre

$$\int_{-\infty}^\infty dx f(x) = \int_{-\infty}^\infty dx [-f(-x)], \quad (\text{C.74})$$

ahol áttérve az $y = -x$ integrálási változóra a Jacobi-determináns $J = \frac{\partial x}{\partial y} = -1$ és az integrál

$$\int_{-\infty}^\infty dx f(x) = \int_{-\infty}^\infty dx [-f(-x)] = \int_{-\infty}^\infty |J| dy [-f(y)] = - \int_{-\infty}^\infty dy f(y). \quad (\text{C.75})$$

Itt viszont a jobb oldalon a baloldali integrál mínusz egyszerese áll, ezért az integrál zérus.

3. Páros kitevőjű monom és Gauss-függvény szorzatának integrálja,

$$I_{2n}(a) = \int_{-\infty}^\infty dx x^{2n} e^{-ax^2} = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial a^n} \int_{-\infty}^\infty dx e^{-ax^2} = (-1)^n \frac{\partial^n I(a)}{\partial a^n}, \quad n \geq 1 \quad (\text{C.76})$$

Behelyettesítve az $I(a) = \sqrt{\pi/a}$ eredményt, és elvégezve az egymás utáni deriválásokat, kapjuk, hogy

$$I_{2n}(a) = \pi^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} \cdots \frac{2n-1}{2} a^{-\frac{2n+1}{2}} = \frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{2^n a^{-n-\frac{1}{2}}}. \quad (\text{C.77})$$

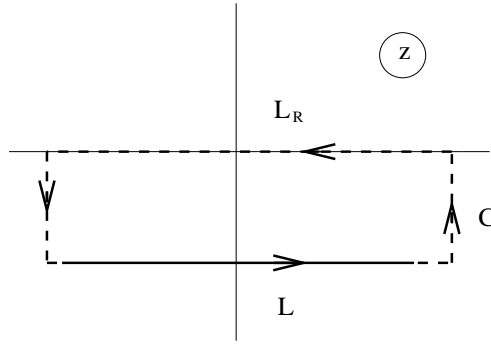


Figure 8: Az integrálás útja a z komplex síkon a C zárt görbe mentén.

4.

$$I(a, b) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2+bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}}, \quad a > 0, \quad (\text{C.78})$$

és b tetszőleges valós paraméter. A bizonyításhoz alakítsuk a kitevőt teljes négyzetté,

$$-ax^2 + bx = -a \left(x - \frac{b}{2a} \right)^2 + \frac{b^2}{4a}, \quad (\text{C.79})$$

majd térjünk át a $z = x - \frac{b}{2a}$ „eltolt” integrálási változóra,

$$I(a, b) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2+bx} = e^{\frac{b^2}{4a}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-az^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}}. \quad (\text{C.80})$$

5. Ha az integrandus kitevőjében $a > 0$ és a lineáris tag együtthatója ib tiszta képzetes (b valós), akkor

$$I(a, b) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2+ibx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\frac{b^2}{4a}}, \quad (\text{C.81})$$

ahol az eredmény nem más, mint a valós lineáris taggal kapott eredményből kapunk $b \rightarrow ib$ 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

$\text{Im } z = -i\frac{b}{2a}$ egyenletű L^{\rightarrow} egyenes mentén történik a z komplex síkon $\text{Re } z = -\infty$ felől $\text{Re } z = +\infty$ irányban haladva (a jobbra mutató nyíl a felső indexben ezt az irányítást jelöli),

$$I(a, b) = e^{\frac{(ib)^2}{4a}} \int_{L^{\rightarrow}} dz e^{-az^2} = e^{-\frac{b^2}{4a}} \int_{L^{\rightarrow}} dz e^{-az^2}. \quad (\text{C.82})$$

Az integrandus analitikus függvénye a z komplex változónak a valós tengely és az L egyenes közti tartományban, ezért

$$\oint_C dz e^{-az^2} = \int_{L^{\rightarrow}} dz e^{-az^2} + \int_{L^{\leftarrow}} dz e^{-az^2} = 0 \quad (\text{C.83})$$

arra a zárt görbére, amely az L^{\rightarrow} egyenesből, a valós L_R^{\leftarrow} tengelyből és a $\text{Re } z \rightarrow \pm\infty$ végtelenekben felvett, a képzetes tengellyel párhuzamos szakaszokból áll (ld. 8. ábra). (A nyílak a felső indexben a haladási irányt jelölik.) A képzetes tengellyel párhuzamos szakaszok járuléka az integrálhoz zérus, mert $\text{Re } y \rightarrow \pm\infty$ esetén az integrandus minden hatványfüggvényénél gyorsabban tart zérushoz. Éért

$$\int_{L^{\rightarrow}} dz e^{-az^2} = - \int_{L_R^{\leftarrow}} dz e^{-az^2} = \int_{L_R^{\rightarrow}} dz e^{-az^2} = \sqrt{\pi}a, \quad (\text{C.84})$$

és az integrál értéke

$$I(a, b) = \sqrt{\pi}ae^{-\frac{b^2}{4a}}. \quad (\text{C.85})$$

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx K(x) f(x) \quad (\text{D.1})$$

alakú integrálok $K(x)$ magjai, ahol $f(x)$ tetszőleges, „jó tulajdonságú” függvény. A Dirac-delta az a mag, amelyre

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x - a) f(x) = f(a) \quad (\text{D.2})$$

teljesül tetszőleges, „jó tulajdonságú” $f(x)$ függvény esetén.

A Dirac-delta integrál alakjában is előállítható:

$$\delta(x - a) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega(x-a)}. \quad (\text{D.3})$$

Valóban, tegyük be ezt a kifejezést a (D.1) alakú integrál magjának a helyébe:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(x-a)} f(x) \\ = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ika} \tilde{f}(k) = f(a). \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

Itt az első egyenlőség az $\tilde{f}(k)$ Fourier-transzformált definíciójából következik, a második egyenlőség pedig az inverz Fourier-transzformáció 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:

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|} \delta(x), \quad (\text{D.5})$$

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{\left| \frac{df(x)}{dx} \Big|_{x=x_i} \right|}, \quad (\text{D.6})$$

$$x\delta(x) = 0, \quad (\text{D.7})$$

ahol α tetszőleges, nem nulla valós szám, $f(x)$ tetszőleges, differenciálható függvény, amelynek zérushelyei az $x = x_i$ helyeken vannak, $f(x_i) = 0$.

A Dirac-delta 3-dimenziós kiterjesztése:

$$\delta(\vec{r} - \vec{a}) = \delta(x - a_x)\delta(y - a_y)\delta(z - a_z) \quad (\text{D.8})$$

ami a

$$\begin{aligned} \int d^3r \delta(\vec{r} - \vec{a}) f(\vec{r}) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \delta(x - a_x)\delta(y - a_y)\delta(z - a_z) f(x, y, z) \\ &= f(a_x, a_y, a_z) = f(\vec{a}) \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

integrállal van értelmezve. A 3-dimenziós Dirac-delta integrálelőállítás:

$$\delta(\vec{r} - \vec{a}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{a})}. \quad (\text{D.10})$$

References

- [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)