

BEVEZETÉS A KVANTUMMECHANIKÁBA

Sailer Kornél

Egyetemi előadás

Elméleti Fizikai Tanszék
Debreceni Egyetem
Debrecen
2002-2008., 2023-ban javítva, kiegészítve

Tartalomjegyzék

1. A KVANTUMMECHANIKA ELVI ALAPJAI	8
1.1. Részecske-hullám dualitás	8
1.2. Az alapelvek	12
1.2.1. A lineáris szuperpozíció elve	12
1.2.2. A fizikai mérések valószínűségi kimenetele	14
1.2.3. A határozatlansági elv	23
1.2.4. Kanonikus kvantálás. A megfeleltetési elv	27
2. MOZGÁSEGYENLETEK A KVANTUM- MECHANIKÁBAN	35
2.1. Az állapotvektor időfüggése	35
2.1.1. A Hamilton-operátor és a Schrödinger-egyenlet	35
2.1.2. Az evolúciós operátor és a Hamilton-operátor	36
2.1.3. A Hamilton-operátor fizikai jelentése	38
2.1.4. A Hamilton-operátor, mint fizikai modell	40
2.2. Fizikai mennyiségek időfüggése	41
2.3. Stacionárius állapotok	42
2.3.1. A stacionárius állapot fogalma és időfüggése	42
2.3.2. Fizikai mennyiségek várható értéke stacionárius állapotban	43
3. ALAPVETŐ FIZIKAI MENNYISÉGEK	44
3.1. Az állapotok és az operátorok ábrázolása	44
3.1.1. Ismétlés: fizikai mennyiségek	44
3.1.2. Az állapottér vektorainak lineáris ábrázolása	47
3.2. A hullámfüggvény koordináta-reprezentációban	52
3.2.1. Pontrészecske	52
3.3. A helykoordináta és az impulzus	54
3.3.1. A helykoordináta operátorának sajátérték-egyenlete	54
3.3.2. Az impulzus Descartes-komponensének operátora	55
3.3.3. Az impulzus Descartes-komponense operátorának sajátfüggvényei	56
3.3.4. Az impulzusoperátor jelentése	59
3.4. A koordináta-hullámfüggvény valószínűségi jelentése	60
3.5. A pályaimpulzusmomentum	62
3.5.1. Pontrészecske pályaimpulzusmomentum-operátorának definíciója	62
3.5.2. Pontrészecske pályaimpulzusmomentum-operátorának jelentése	64

3.5.3.	Pontrészecske pályaimpulzusmomentumának megmaradása	64
3.5.4.	A pályaimpulzusmomentum négyzete	65
3.5.5.	A pályaimpulzusmomentum léptető operátorai	66
3.5.6.	A pályaimpulzusmomentum operátora gömbi polárkoordináta-rendszerben	67
3.5.7.	A pályaimpulzusmomentum operátorának sajátfüggvényei és sajátértékei	68
3.5.8.	Forgásszimmetrikus egy-részecskés rendszer stacionárius állapotai . .	74
3.6.	A teljes impulzusmomentum és a spin	75
3.6.1.	A teljes impulzusmomentum	75
3.6.2.	A spin	76
3.6.3.	Az impulzusmomentumok összeadása	77
3.6.4.	Az elektron spinje. Az $\frac{1}{2}$ -spin	80
4.	EGYSZERŰ FIZIKAI RENDSZEREK	83
4.1.	Spin külső mágneses térben	83
4.1.1.	Szabad spin	83
4.1.2.	Spin homogén külső mágneses térben	87
4.1.3.	A Larmor-precesszió*	90
4.2.	Pontrészecske mozgása	92
4.2.1.	Belső szabadsági fokok nélküli részecske Hamilton-operátora	93
4.2.2.	Nem zérus spinű részecske Hamilton-operátora*	94
4.2.3.	Szabad részecske mozgása inerciarendszerben	96
4.2.4.	A hullámcsomag szétfolyása	100
4.2.5.	Ehrenfest tétele. Newton törvényei?	103
4.2.6.	Mikor végez a részecske a klasszikus mechanikaira emlékeztető mozgást?*105	
4.2.7.	A Schrödinger-egyenlet és a kvantummechanika klasszikus határeset	107
4.2.8.	Dobozba zárt részecske	109
4.2.9.	A dobozba zárt részecske problémája, mint határeset	117
4.2.10.	Az egy-dimenziós mozgásra vonatkozó időtől független Schrödinger-egyenlet megoldásairól	123
4.2.11.	Részecske visszaverődése végtelen potenciálfalról	127
4.2.12.	Alagúteffektus	134
4.2.13.	Lineáris harmonikus oszcillátor	141
4.2.14.	Részecske mozgása centrális potenciálban	155
4.2.15.	Hidrogénatom	161

4.2.16. Részecske szóródása centrális potenciálon. Szórási amplitúdó és hatáskeresztmetszet	174
5. RÉSZESKERENDSZEREK	185
5.1. Összetett rendszer	186
5.1.1. Független részekből álló rendszer	189
5.1.2. Kölcsönható részekből álló rendszer	192
5.1.3. N -részecskés rendszer koordináta-hullámfüggvénye	193
5.1.4. N -részecskés rendszer koordináta-hullámfüggvényének valószínűségi jelentése*	194
5.1.5. A teljes impulzus	197
5.1.6. Az eredő pályaimpulzusmomentum	200
5.1.7. A pályaimpulzusmomentumok összeadása	202
5.2. A teljes impulzusmomentum	204
5.3. Részecskeazonosság. Fermionok és bozonok	209
5.4. A részecskeazonosság néhány következménye	213
5.5. A lézer*	217
5.6. Atomok Mengyelejev-féle periódusos rendszere	219
5.7. Ideális gázok alacsony hőmérsékleten*	221
5.8. Bose-kondenzátumok interferenciája*	223
6. KÖZELÍTŐ MÓDSZEREK	225
6.1. Stacionárius állapotok meghatározása	225
6.1.1. A Hamilton-operátor diagonalizálása	225
6.1.2. Idő-független, nem elfajult perturbációs számítás	227
6.1.3. Degenerált perturbációs számítás	231
6.2. Időfüggő perturbációk	234
6.2.1. Fermi-féle „arany szabály”	234
6.2.2. Nívószélesség és élettartam, bomlási szélesség és felezési idő	240
A. A kvantummechanika kísérleti alapjai	241
A.1. A kvantummechanika kísérleti előzményei	241
A.1.1. A foton, mint az elektromágneses mező részecskéje	241
A.1.2. Anyaghullámok	251
A.1.3. Az atomok diszkrét gerjesztési energiái	253
A.1.4. Az elektron spinjének felfedezése	256
A.2. A kvantummechanika néhány további kísérleti bizonyítéka*	259

B. Várható érték, szórásnégyzet	265
C. Gauss-integrál*	270
D. Dirac-delta	272
E. Hilbert-tér	275
E.1. Definiáló tulajdonságok	275
E.2. A Hilbert-tér geometriája	278
E.2.1. Ortonormált rendszerek	278
E.2.2. Zárt lineáris sokaságok és projektoraik	279
E.3. Operátorok	281
E.4. Az L_2 és az ℓ_2 Hilbert-terek	284
F. A folytonos spektrumhoz tartozó nem valódi sajátvektorok	286
F.1. A saját differenciálok és a nem valódi sajátvektorok kapcsolata	286
F.2. A saját differenciálok és a Neumann-féle spektrális előállítás kapcsolata . . .	291
F.3. A koordináta- és az impulzus-operátorhoz tartozó saját differenciálok koordináta-reprezentációban	296
G. A harmonikus oszcillátor koherens állapotai[8, 9]	297
G.1. Az időtől független koherens állapotok	297
G.2. A koherens állapotok időfüggése	301
H. A hélium-atom	305

1. A KVANTUMMECHANIKA ELVI ALAPJAI

A kvantummechanika célja az anyag mikroszkopikus méreteken, 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 határeseteként.

A kvantummechanikai viselkedés jellegzetességeit általában mikroszkopikus rendszerek esetében figyelhetjük meg. Így pl. a molekulák, atomok, atommagok diszkrét spektrumú elektromágneses sugárzást bocsátanak ki, ami ezen rendszerek gerjesztési energiáinak diszkrét voltára utal. Megfigyelhetjük továbbá, hogy egy részecske (kettős) résen áthaladva elhajlási képet hoz létre, mint ahogy az elektromágneses hullám. A mikroszkopikus rendszerek mellett a sok-részecskés, makroszkopikus rendszerek is mutathatják azonban megfelelő körülmények között a kvantummechanikai viselkedés sajátos jegyeit. Például a gázok, a szilárdtestek nagyon alacsony hőmérsékleten ugyancsak a klasszikus fizikaitól eltérő törvényszerűségeket mutatnak, ami a kvantummechanika alapján értelmezhető. 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 fizikához hasonló viselkedést bizonyos körülmények között. Például **egy kvantummechanikai pont részecske (pl. az elektron vagy a proton) bizonyos esetekben úgy viselkedik, mint egy klasszikus pont részecske, 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 pont részecske. Nevezetesen, két elektron ütközésében az energia- és az impulzusmegmaradás törvényei ugyanolyan formában érvényesek, mint két klasszikus mechanikai pont részecske 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 kvantált².

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 részeikre bonthatók, s így sem energiájuk, sem impulzusuk, sem töltésük nem oszthatatlan.

Ha az elektronok azonban klasszikus fizikai részecskék lennének, akkor a kör alakú résen áthaladó elektronok mind a réssel szemben elhelyezkedő, kör alakú „foltba” csapódának 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).

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.

²Ez a megállapítás minden, önálló létezőként megjelenni képes testre (részecskére) érvényes, de nem érvényes a kvarkokra, amelyek a tapasztalat szerint nem jelennek meg önálló entitásként, szabad részecskéként, hanem csak a hadronok alkatrészeként. A kvarkok törttöltéssel rendelkeznek.

Az impulzus és a hullámhossz közti de Broglie-féle összefüggés azt sugallja, hogy az m_0 nyugalmi tömegű, $\vec{p}$ impulzusú részecske hullámszerű viselkedését a

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} = A e^{\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})} \quad (1.1.3)$$

alakú síkhullámmal írható le, ahol $E = \hbar\omega$, $\vec{p}$ és $\vec{k}$ egyirányúak és $p = \hbar k$. Ennek fázisa $\phi(\vec{r}, t) = \omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}$. A fázis idő szerinti első deriváltja $\dot{\phi} = \omega - \vec{k} \cdot \vec{v}$, ezért az állandó fázisú helyek sebessége a $\dot{\phi} = 0$ egyenlőség alapján

$$\vec{v}_f = \dot{\vec{r}} = \frac{\omega}{k} \frac{\vec{k}}{k} = \frac{E}{p} \frac{\vec{p}}{p}. \quad (1.1.4)$$

Ez a monokromatikus síkhullám azonban diszperzióval rendelkezik: a különböző frekvenciájú (hullámhosszú) hullámok fázissebessége különböző: $v_f = v_f(k)$. A diszperzió abból következik, hogy az E/p hányados függ az impulzustól:

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2} \stackrel{v \ll c}{\approx} m_0 c^2 + \frac{p^2}{2m_0} + \dots, \quad (1.1.5)$$

$$p = mv = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \stackrel{v \ll c}{\approx} m_0 v, \quad (1.1.6)$$

$$\omega(k) = \frac{E}{\hbar} \stackrel{v \ll c}{\approx} \frac{m_0 c^2}{\hbar} + \frac{\hbar k^2}{2m_0} + \dots, \quad (1.1.7)$$

$$v_f(k) = \frac{\omega(k)}{k} \stackrel{v \ll c}{\approx} \frac{m_0 c^2}{\hbar k} + \frac{\hbar k}{2m_0} + \dots, \quad (1.1.8)$$

ahol m a részecske mozgási tömege. Ráadásul a fázissebesség $v_f = E/p = mc^2/mv = c^2/v$ mindig nagyobb, mint 1, mert a részecske sebessége $v < c$. Az anyaghullám fázissebessége tehát nem azonosítható a részecske sebességével. (A kvantummechanikában látni fogjuk, hogy a sebesség a hagyományos módon nem is definiálható fogalom.) Tegyük ehhez még hozzá, hogy a síkhullám végtelen kiterjedésű hullámvonulat. Figyeljük meg, hogy élesen meghatározott impulzusú részecske hullámszerű viselkedését a térben végtelen kiterjedésű hullámvonulat írja le.

Ugyanakkor hiányérzetünk támad, mert az elektronforrások, az ionforrások, a részecskegyorsítók olyan állapotban állí tanak elő részecskéket, amelyeknek elég jól definiált impulzusuk és energiájuk van, továbbá térben is kb. annyira lokalizáltak, mint amekkora a részecskeforrás kimeneti nyílása. Hogy lehet ilyen állapotú anyagdarabokat anyaghullámmal kapcsolatba hozni. A megoldást az jelenti, hogy közel azonos hullámszámú (hullámhosszú) síkhullámokból alkalmas lineáris kombinációt, úgy nevezett hullámcsomagot képezünk:

$$\psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} dk \, c(k) e^{i(\omega(k)t - kx)}, \quad (1.1.9)$$

ahol k_0 a hullámszámok közéértéke, amelynek $2\Delta k$ „sugarú” környezetéből vett síkhullámokat használtunk és $c(k)$ az egyes síkhullám-összetevőknek a k hullámszámtól gyengén függő (komplex) amplitúdói. Itt feltesszük, hogy $\Delta k \ll k_0$. (az egyszerűség kedvéért az x -tengely irányában haladó részecske esetére szorítkozunk.) Az integrandus gyorsan oszcilláló tényezőjének kitevőjében ezért Taylor-sorba fejthetjük $\omega(k)$ -t a $k = k_0$ hely körül,

$$\omega(k) \approx \omega(k_0) + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} (k - k_0) + \dots, \quad (1.1.10)$$

és a $\xi = k - k_0$ -ban négyzetes és magasabb rendű tagokat elhagyva azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}
\psi(x, t) &\approx e^{i[\omega(k_0)t - k_0x]} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} d\xi c(k_0 + \xi) e^{i(v_g t - x)\xi} \approx e^{i[\omega(k_0)t - k_0x]} \\
&\approx c(k_0) \frac{e^{i(v_g t - x)\Delta k} - e^{-i(v_g t - x)\Delta k}}{i(v_g t - x)} \\
&\approx 2c(k_0)\Delta k \frac{\sin((v_g t - x)\Delta k)}{(v_g t - x)\Delta k} e^{i[\omega(k_0)t - k_0x]}, \tag{1.1.11}
\end{aligned}$$

ahol bevezettük a

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} \tag{1.1.12}$$

csoportsebességet. Az elnevezés nem véletlen. A hullámcsomag kifejezésében szereplő $\frac{\sin z}{z}$ függvény páros függvény, amelynek $z \rightarrow 0$ helyen 1 az értéke (főmaximuma), növekvő z -vel gyorsan oszcillálva csökken és a $|z| \rightarrow \infty$ határesetben zérushoz tart. A hullámcsomag főmaximuma a $z = 0$ egyenlőségből adódóan $x = v_g t$ helyen található a t pillanatban, vagyis éppen a csoportsebességgel mozog. Másrészt a csoportsebesség

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} = \left. \frac{dE}{dp} \right|_{p=p_0} \stackrel{v \ll c}{\approx} \frac{p_0}{m_0} \tag{1.1.13}$$

a nem relativisztikus részecske sebességével azonosítható. A hullámcsomag térben véges kiterjedésű, amelynek Δx szélességét jellemezhetjük a $\frac{\sin z}{z}$ függvény főmaximuma ($z = 0$) és első minimum helyeinek $|z_m| = \pi/\Delta k$ közti távolságának 2-szeresével: $\Delta x \geq \frac{2\pi}{\Delta k}$, ahonnan

$$\Delta x \Delta p = \Delta x \hbar \Delta k \geq 2\pi\hbar. \tag{1.1.14}$$

A részecske-hullám dualitás tehát azt sugallja, hogy a részecske helye és impulzusa bizonytalanságának szorzata alulról korlátos legyen egy, a Planck-állandó nagyságrendjébe eső értékkel. Végül jegyezzük még meg, hogy $\omega(k)$ Taylor-sorfejtésében elhanyagoltuk a lineárisnál magasabb rendű tagokat. Ha figyelembe vesszük pl. a kvadrátikus tagot is, akkor a hullámcsomag alakja nem marad változatlan, hanem elkezd szétfolyni, azaz az egész objektumnak megnő a Δx t erbeli kiterjedtsége.

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.

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 pont részecske 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

hasnólóan 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 pontrészekre érvényes Einstein-féle $E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$ összefüggés alapján **a foton nyugalmi tömege zérusnak adódik:**

$$m_0^2c^4 = E^2 - p^2c^2 = \hbar^2(\omega^2 - k^2c^2) = 0. \quad (1.1.15)$$

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

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

1.2. Az alapelvek

Ebben a fejezetben a kvantummechanika alapelveit, a lineáris szuperpozíció elvét és a határozatlansági elvet fogalmazzuk meg. Megismerkedünk továbbá a kvantummechanikai rendszerek viselkedésének azon matematikai leírásmódjával, amely ezeken az elveken alapul. Ebben különösen fontos szerepet kap a kvantummechanikai történések matematikai véletlen kísérletre emlékeztető, azaz valószínűségi jellege és a fizikai mennyiségeknek várható 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 változó párokat 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.**³ 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.**

³Ebben a jegyzetben csak zárt, azaz környezetükkel kölcsön nem ható fizikai rendszerekről, vagy adott külső térbe helyezett fizikai rendszerekről beszélünk, amelyekre ez a feltevés helytállónak bizonyult.

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 Fourier⁴-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 komplex számok.**

A fizikai rendszer állapottere

A lineáris szuperpozíció elve azt sugallja, hogy az állapotok halmazán értelmezve kell legyen az összeadás és a komplex számmal való szorzás. Kézenfekvő tehát elfogadni, **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 „psi-ket”-nek olvassuk. Az állapotok lineáris vektorterét $\mathcal{H}$ -val

⁴Jean 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 Hilbert⁵-terének nevezzük⁶.

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 klasszikus mechanikában hozzá vagyunk szokva, hogy ha valamilyen fizikai mennyi-

⁵David Hilbert (1862-1943, német) matematikus. Kiemelkedőt alkotott az invariánselmélet, az algebrai számelmélet területén, Euklidész után a legnagyobb hatással volt a geometria fejlődésére. Az általa felvetett 23 matematikai probléma és közülük egy-egy megoldása a XX. században jelentős kihatással volt a matematika fejlődésére. Integrálegyenletekről 1909-ben írott munkája indította el a funkcionálanalízis terén a XX. századi kutatásokat, és ugyancsak alapját képezte azon saját kutatásainak, amelyekben a később róla elnevezett Hilbert-tér fogalma megszületett. Még Einstein előtt, tőle függetlenül felfedezte az általános relativitáselmélet helyes téregyenleteit. Érdekes megjegyezni, hogy Heisenberg a kvantummechanikát először mátrixmechanika alakjában, azaz olyan elmélet alakjában fogalmazta meg, ameyben az összefüggéseket mátrixalakban és nem függvényekre vonatkozó differenciálegyenletek alakjában írta fel. Hilbert hívta fel arra a fizikusok figyelmét, hogy keressék a „hasznosabb”, differenciálegyenletekkel dolgozó matematikai megfogalmazást.

⁶Ez 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 kapcsolatait keresve Neumann János (1903-1957, magyar-amerikai) matematikus mutatta meg, hogy hogyan lehet az „absztrakt Hilbert-tér” fogalmának és matematikai „eszköztárának” segítségével megfogalmazni a kvantummechanika matematikai alapjait. Neumann munkássága kiterjedt az axiomatikus halmazelméletre, a matematikai logikára, a mértékelméletre, kidolgozta a kvantummechanika matematikai kereteit, majd a Hilbert-téren ható operátorok algebráit, amelyeket von Neumann-algebráknak is szoktak nevezni. Jelentősen továbbfejlesztette a játékelméletet, behatóan tanulmányozta a hidrodinamikai turbulencia és lökéshullámok nem lineáris egyenleteit. Úttörő munkásságot végzett a számítástudomány területén, megépítette az első elektronikus számítógépet, az automataelmélet terén kifejtett munkásságával a számítástudomány alapjait rakta le.

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

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

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

séget mérünk egy meghatározott állapotban levő mechanikai rendszeren, akkor egyértelmű az eredmény: akárhányszor ismételjük meg ugyanazon rendszer ugyanazon állapotú másolatain (kópiáin) ugyanazt a mérést, mindig ugyanazt a mérési eredményt olvashatjuk le a mérőeszközhöz. (Most ideális mérőeszközt feltételezünk, amelynek nincsen mérési hibája. A klasszikus fizikai mérés hibája ugyanis tetszőlegesen kicsivé tehető.) Ezzel szemben a kvantummechanikai rendszeren történő mérés a matematikai véletlen kísérletre emlékeztet: ha ugyanazon rendszer ugyanazon állapotú másolatain ismételjük meg (egymástól függetlenül) ugyanazt a mérést, akkor különböző gyakorisággal különböző eredményeket kaphatunk.

Végezzük el pl. a Young-féle interferencia-kísérletet elektronokkal. Az interferenciakép regisztrálására helyezzünk el kicsiny elektron-detektorokat a kettős réstől adott távolságra elhelyezett, az eredeti nyalábirányra merőleges ernyő mentén úgy, hogy azok egymással érintkezve teljesen lefedjék az ernyőt. Ha elektron érkezik a felfogó ernyő valamely detektor által lefedett darabkájára, akkor az a detektor megszólal. Az interferenciakép úgy fog kirajzolódni, mint a beütésszám helyfüggését ábrázoló hisztogram. Fontos tudatosítanunk a következőket: (a) egy detektor mindig egy teljes elektront detektál (a teljes $-|e|$ töltést); (b) ha olyan gyenge az elektronnyaláb intenzitása, hogy a rendszerben egyszerre mindig csak 1 darab elektron tartózkodik, akkor is kialakul az interferenciakép. Ez utal arra, egyrészt, hogy az interferenciaképeség, a hullámszerű viselkedés egyetlen elektron állapotának is sajátja. Másrészt világosan látszik, hogy a kettős réses berendezéssel történő mérés eredménye véletlenszerű. Ha $N \gg 1$ darab elektronnal végezzük el egymás után függetlenül a kísérletet, akkor az ernyő i -edik detektora n_i **gyakorisággal** szólal meg, és n_i/N **relatív gyakoriság** valamilyen w_i **valószínűséghez** tart az $N \rightarrow \infty$ határesetben. Nyilván $\sum_i n_i = N$ és $\sum_i w_i = 1$. A mérés eredménye tehát nem kauzális, hanem véletlenszerű, amelyet jól definiált valószínűségi eloszlás jellemez.

A fizikai mérés a következő lépésekből áll:

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 van az *adott állapotban található* klasszikus fizikai rendszeren végzett mérés és az *adott állapotban található* kvantummechanikai rendszeren végzett mérés között: amíg a klasszikus fizikai rendszeren végzett mérésnek bizonyosan egyféle kimenetele van, addig a **kvantummechanikai rendszeren elvégzett mérésnek általában többféle kimenetele lehetséges.**

Tegyük fel, hogy az f fizikai mennyiséget mérjük. 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. Didaktikai okokból egyelőre csak diszkrét spektrumú fizikai mennyiségekről fogunk beszélni, a folytonos spektrum esetével majd később foglalkozunk. **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 semmilyen 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 $|\phi_i\rangle$ állapotba kerül. Az állapotvektornak ezt az ugrásszerű változását **az állapotvektor összeomlásának** szokás nevezni. Az elnevezés értelmére még visszatérünk a későbbiekben. A kvantumfizika egyik nyitott, ma is kutatott kérdése, hogy hogyan is történik az állapot összeomlása? A másik ilyen nyitott kérdés, hogy

hogyan is tud a valójában ugyancsak a kvantumfizika törvényeinek engedelmeskedő mérőberendezés klasszikus fizikai állapotba kerülni, „leolvasható mutatóállást” megvalósítani.

A fizikai mennyiség, mint várható érték

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

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

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

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 $(\psi, \phi) \equiv \langle\psi|\phi\rangle$ módon jelöljük. (Általában kétféle, azonos jelentésű jelölés közül a második, „bra ψ ϕ ket” jelölést fogjuk használni, esetenként teszünk csak kivételt a jobb érthetőség érdekében.) A Hilbert-terben a skaláris szorzatot szokás **belső szorzatnak** is nevezni. A skaláris szorzattól megköveteljük, hogy

- (a) értéke véges komplex szám legyen,

- (b) legyen lineáris a második tényezőjében, 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 legyen hermitikus:

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

- (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 bekövetkezésének 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:** ha $|\phi\rangle$ tetszőleges fizikai állapotot jelentő vektor, akkor $|\psi\rangle = \frac{|\phi\rangle}{\| |\phi\rangle \|}$ a megfelelő 1-re normált vektor, mert a $\| |\phi\rangle \| = 0$ esetet kizártuk a fizikai állapotok közül.

Másképpen szólva, a $c|\psi\rangle$ ($c \neq 0$ tetszőleges komplex szám, $|\psi\rangle$ tetszőleges, egységnyi normájú vektor) fizikai állapotok, amelyek csak a normájukban különböznek, azonos fizikai állapotnak tekinthetők és reprezentálhatók a megfelelő egységnyi normájú állapottal.

5. **Két fizikai állapotot, $|\psi\rangle \neq |0\rangle$ és $|\phi\rangle \neq |0\rangle$ ortogonálisnak nevezünk, ha a skalárszorzatuk zérus: $\langle\psi|\phi\rangle = 0$.** A Hilbert-tér két alterét ortogonálisnak nevezzük, ha az egyikből vett bármely vektor ortogonális a másikkól vett tetszőleges vektorra.
6. A Hilbert-tér dimenziója a benne, mint lineáris vektortérben fellelhető lineárisan független vektorok maximális számával egyenlő. Ez lehet véges, vagy megszámlálhatóan végtelen. Véges d -dimenziós Hilbert-térben mindig létezik pontosan d darab állapotvektort tartalmazó ortonormált $|\varphi_1\rangle, \dots, |\varphi_d\rangle$ teljes rendszer, amely eleget tesz az **ortonormáltsági feltételnek**,

$$\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{i,j}, \quad (i, j = 1, \dots, d), \quad (1.2.8)$$

és amelyre teljesül a **teljességi feltétel**, azaz tetszőleges $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ vektorhoz léteznek olyan $c_i \in \mathbb{C}$ ($i = 1, \dots, d$) komplex számok, hogy

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^d c_i |\varphi_i\rangle. \quad (1.2.9)$$

Az ortonormáltsági relációt felhasználva innen azonnal adódik, hogy $c_i = \langle\varphi_i|\psi\rangle$. Végtelen dimenziós Hilbert-térben is létezik ortonormált rendszer, amely vagy véges vagy megszámlálhatóan végtelen sok elemet tartalmaz. Ha az ortonormált rendszer teljes, akkor elemeinek száma megszámlálhatóan végtelen. Utóbbi azonban még nem garantálja a teljességet. Ezért a Hilbert-tértől megköveteljük, hogy legyen teljes és szeparábilis (ld. E. függelék). Ezek a tulajdonságok biztosítják, hogy a végtelen dimenziós Hilbert-térben is létezik $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots$ ortonormált teljes rendszer, amelyre érvényes az ortonormáltsági feltétel,

$$\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{i,j}, \quad (i, j = 1, 2, \dots), \quad (1.2.10)$$

és (alkalmas $c_i \in \mathbb{C}$ komplex számokkal) a teljességi feltétel,

$$|\psi\rangle = \sum c_i |\varphi_i\rangle \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}. \quad (1.2.11)$$

Utóbbiban végtelen sor összege szerepel most; ez a végtelen sor abszolút konvergens, mert a tetszőleges $|\psi\rangle$ vektorok normája véges. Most is automatikusan adódik, hogy $c_i = \langle\varphi_i|\psi\rangle$.

A fizikus a teljességi relációt úgy értelmezi, hogy a $|\psi\rangle$ állapot a $|\varphi_i\rangle$ ($i = 1, 2, \dots$) állapotok lineáris szuperpozíciója, és a $|\psi\rangle$ állapotban valamely $|\varphi_i\rangle$ állapot c_i amplitúdóval van jelen.

7. 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 kifestik. (Egyelőre

megint csak a diszkrét spektrumú mennyiségek esetére szorítkozunk.) Ez akkor következik be, ha az $\hat{f}$ lineáris operátor önadjungált. **Az $\hat{f}$ lineáris operátort önadjungálnak nevezzük, ha $\hat{f} = \hat{f}^\dagger$, ahol $\hat{f}^\dagger$ az $\hat{f}$ operátor adjungáltja. Az $\hat{f}^\dagger$ operátort az $\hat{f}$ operátornak az adott skalárszorzatra vonatkozó adjungáltjának nevezzük, ha bármely $|\phi\rangle$ és $|\psi\rangle$ állapotvektorok esetén,**

$$\langle\psi|\hat{f}^\dagger|\phi\rangle = [\langle\phi|\hat{f}|\psi\rangle]^* \quad (1.2.12)$$

teljesül. Itt a $\langle\phi|\hat{f}|\psi\rangle = (\phi, \hat{f}\psi)$ 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

$$\langle\psi|\hat{f}|\phi\rangle = [\langle\phi|\hat{f}|\psi\rangle]^*. \quad (1.2.13)$$

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.⁷

Elfajult spektrum esetére be lehet bizonyítani azt, hogy **az $\hat{f}$ önadjungált operátor különböző f_i sajátértékeihez tartozó $\mathcal{H}_i$ sajátaltér páronként ortogonálisak és direkt összegük⁸ a teljes Hilbert-teret kifesti, $\mathcal{H} = \sum_i \oplus \mathcal{H}_i$. Ezért mindig találhatunk a $\mathcal{H}$ Hilbert-térben olyan ortonormált teljes rendszert, amelynek minden $\mathcal{H}_i$ altérben pontosan annyi eleme van, ahány dimenziós az adott altér. Ha minden $\mathcal{H}_i$ altér egy-dimenziós, akkor a fizikai mennyiség különböző sajátértékeihez tartozó normált sajátvektorok halmaza ortonormált teljes rendszert alkot a $\mathcal{H}$ állapottérben.**⁹

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 elfajultak. Az általánosítás elfajult sajátértékek esetére nem jár elvi nehézséggel.

⁷Hasznos számolási szabály, hogy operátort a belső szorzat egyik tényezőjéről „áttehetünk” a másikra, ha az adjungáltjára cseréljük. Legyen $\hat{A}$ lineáris operátor, $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ tetszőleges vektorok, akkor $(\hat{A}\phi, \psi) = (\phi, \hat{A}^\dagger\psi)$, hiszen $(\hat{A}\phi, \psi) = (\psi, \hat{A}\phi)^* = (\psi, \hat{A}^*\psi) = (\phi, \hat{A}^\dagger\psi)$. Itt felhasználtuk, hogy operátor komplex konjugáltját a $\langle\psi|\hat{A}^*|\psi\rangle \equiv (\phi, \hat{A}^*\psi) = (\phi, \hat{A}\psi)^* \equiv \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^*$ összefüggés definiálja.

⁸A $\mathcal{H}$ 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 $|\phi_i\rangle \in \mathcal{H}_i$ ($i = 1, 2$).

⁹Az altér fogalmát a zárt lineáris sokaság szinonímájaként használom. A zárt lineáris sokaság olyan lineáris sokaság, amely tartalmazza valamennyi konvergens sorozatának határpontját. Maga a Hilbert-tér is definíció szerint zárt lineáris sokaság. Konvergencián normában történő konvergenciát értek.

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

$$\langle\phi_j|\phi_i\rangle = \delta_{i,j} \quad (1.2.14)$$

azonosságok, ahol $\delta_{i,j}$ a Kronecker-delta. A sajátfüggvények rendszerének **teljessége** pedig azt jelenti, hogy tetszőleges $|\psi\rangle$ állapot felbontható az f fizikai mennyiség sajátállapotai szerinti lineáris kombináció alakjában,

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle = \sum_i |\phi_i\rangle \langle\phi_i|\psi\rangle. \quad (1.2.15)$$

Itt felhasználtuk, hogy a sajátvektorok ortonormáltsága következtében a lineáris kombinációban fellépő együtthatók

$$c_i = \langle\phi_i|\psi\rangle. \quad (1.2.16)$$

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

$$\hat{1} = \sum_i \hat{P}_i = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|. \quad (1.2.17)$$

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

$$\hat{P}_i|\psi\rangle = |\phi_i\rangle\langle\phi_i|\psi\rangle, \quad (1.2.18)$$

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

$$\hat{P}_i^2 = \hat{P}_i \quad (1.2.19)$$

azonosság áll fenn bármely projektor-operátorra. A $\hat{P}_i$ projektorok önadjungált operátorok: $\hat{P}_i = \hat{P}_i^\dagger$ ¹⁰.

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

$$w_i = |c_i|^2 = |\langle\phi_i|\psi\rangle|^2 \geq 0 \quad (1.2.20)$$

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

$$1 = \langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{1}|\psi\rangle = \sum_i \langle\psi|\hat{P}_i|\psi\rangle = \sum_i \langle\psi|\phi_i\rangle\langle\phi_i|\psi\rangle = \sum_i |c_i|^2 = \sum_i w_i. \quad (1.2.21)$$

¹⁰A bizonyításhoz képezzük tetszőleges vektorokkal a $\langle\phi|\hat{P}_k|\psi\rangle$ és a $\langle\phi|\hat{P}_k|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{P}_k|\phi\rangle^*$ mátrixelemeket, ahol $\hat{P}_k$ a $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots$ ortonormált teljes rendszer k -adik elemére vetítő projektor, azaz amelyre $\hat{P}_k|\varphi_i\rangle = \delta_{i,k}|\varphi_i\rangle$. Fejtsük ki mindkét esetben $|\phi\rangle$ -et és $|\psi\rangle$ -et ezen ortonormált teljes rendszer szerint. A $\hat{P}_k$ projektor hatását figyelembe véve azonnal megkapjuk a bizonyítani kívánt $\langle\phi|\hat{P}_k|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{P}_k|\phi\rangle^*$ egyenlőséget.

8. 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,

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle, \quad (1.2.22)$$

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

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{mérés}} |\phi_i\rangle, \quad (1.2.23)$$

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

$$\langle \phi_{i_0} | \psi \rangle = \langle \phi_{i_0} | \phi_{i_0} \rangle = 1, \quad \langle \phi_{j \neq i_0} | \psi \rangle = \langle \phi_{j \neq i_0} | \phi_{i_0} \rangle = 0. \quad (1.2.24)$$

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

$$\bar{f} = \langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle \quad (1.2.25)$$

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

$$\bar{f} = \langle \phi_i | \hat{f} | \phi_i \rangle = f_i \langle \phi_i | \phi_i \rangle = f_i. \quad (1.2.26)$$

Ilyenkor a $\bar{f}$ várható érték pontosan megegyezik a fizikai mennyiség azon f_i értékével, amelyhez tartozó $|\phi_i\rangle$ sajátállapotban van a rendszer a mérés előtt (és közvetlenül a mérés után is) a fizikai rendszer.

Ha a rendszer nincsen az f mennyiségnek megfelelő sajátállapotban, akkor

$$\begin{aligned} \bar{f} = \langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle &= \sum_{i,j} \langle \psi | \phi_i \rangle \langle \phi_i | \hat{f} | \phi_j \rangle \langle \phi_j | \psi \rangle = \sum_{i,j} c_i c_j^* \delta_{ij} f_i \\ &= \sum_i |c_i|^2 f_i. \end{aligned} \quad (1.2.27)$$

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 várható érték képzésének (valószínűség-számításból ismert) szabálya 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

$$(\psi, \phi) = \langle \psi | \phi \rangle \quad (1.2.28)$$

alakban jelöltük¹¹, a $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ és $\hat{f}|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ vektorokét pedig

$$(\psi, \hat{f}\phi) = \langle \psi | \hat{f} | \phi \rangle \quad (1.2.30)$$

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:

$$(\hat{f}\psi, \phi) = (\phi, \hat{f}\psi)^* = (\phi, \hat{f}^*\psi) = \langle \phi | \hat{f}^* | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{f}^\dagger | \phi \rangle \quad (1.2.31)$$

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 $|\dots\rangle$ ket-, 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:

$$\hat{P}_i = |\phi_i\rangle\langle\phi_i|, \quad (1.2.32)$$

az egységoperátor

$$\hat{1} = \sum_i \hat{P}_i = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|, \quad (1.2.33)$$

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

$$\hat{f} = \hat{f}\hat{1} = \hat{f} \sum_i \hat{P}_i = \sum_i (\hat{f}|\phi_i\rangle)\langle\phi_i| = \sum_i f_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| = \sum_i f_i \hat{P}_i. \quad (1.2.34)$$

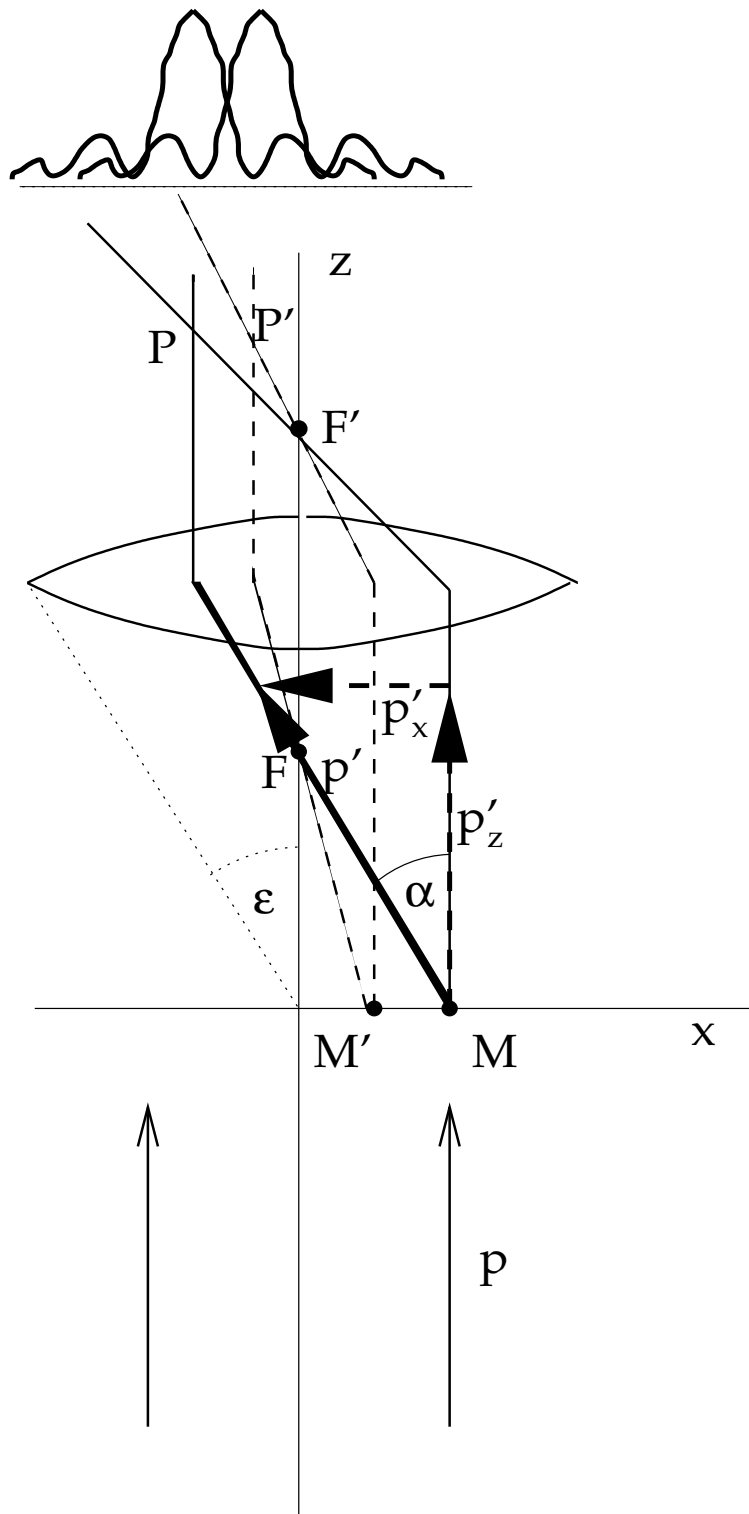
1.2.3. A határozatlansági elv

A határozatlansági elv azt mondja, hogy a kvantummechanikai rendszer két olyan jellemzőjét, amelyek klasszikusan egymás kanonikusan konjugált párjai, nem lehet egyidejűleg tetszőleges pontossággal megmérni. Amikor az elvet megfogalmazzuk, akkor ideális mérésre kell gondolni, amelynek nincsen mérési hibája. A határozatlansági elv tehát elvi korlátot fogalmaz meg a kanonikusan konjugált fizikai mennyiségek egyidejű mérésének eredményével kapcsolatban.

¹¹Nem tettünk különbséget a (ψ, ϕ) skalárszorzat és annak jelölése között, hogy a $(\psi, \dots)$ skalárszorzat minden rögzített $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ vektor esetén értelmez egy $\langle \psi |$ („bra-pszf”) lineáris leképezést,

$$\langle \psi | : \forall |\phi\rangle \in \mathcal{H} \mapsto \langle \psi | \phi \rangle = (\psi, \phi) \in \mathbb{C}, \quad (1.2.29)$$

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



1. ábra. A Heisenberg-féle mikroszkópos gondolkísérlet vázlatja.

A határozatlansági elv működése megnyilvánul például az elektron tartózkodási helye és impulzusa egyidejű mérésének eredményében. A klasszikus mechanikában azt tanultuk, hogy a pontrészcseke 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 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 pontrészcseke mozogna ezen sugármenetek, 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 pontrészcseke lenne. Ha azonban az elektronok ugyanúgy elhajlási jelenséget mutatnak, mint a klasszikus elektromágneses hullám, akkor az M tárgypont képe nem a P pont, hanem egy elhajlási kép fő- és mellékmaximumokkal, amely a képsíkban P -re szimmetrikusan figyelhető meg, és amelynek főmaximuma a P pontban van. Az M közelében található M' tárgypont képe ugyancsak a képsíkban létrejövő, a P' képpontra centrált hasonló elhajlási kép. Az elektronmikroszkóp segítségével az M és M' tárgypontokat akkor és csak akkor tudjuk egymástól megkülönböztetni, ha a képsíkban a két szóbanforgó elhajlási kép P és P' főmaximuma kellően távol esik egymástól. Erre az elfogadott kritérium, hogy a P körüli elhajlási kép első minimuma helyére vagy ennél távolabbra essen P' , azaz az M' ponton, mint akadályon elhajlott hullámok elhajlási képének főmaximuma. Az optikai analógia alapján tudjuk, hogy ez a kritérium a két szomszédos tárgypont közti legkisebb $\overline{MM'} = \delta x$ távolságra

$$\delta x = \frac{\lambda}{2 \sin \epsilon}, \quad (1.2.35)$$

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 elektron-mikroszkóp esetében is. Az elektronok hullámhossza a de Broglie-féle összefüggés alapján $\lambda = \frac{h}{p}$. Az M tárgy helyét tehát csak

$$\delta x = \frac{\lambda}{2 \sin \epsilon} = \frac{h}{2p \sin \epsilon} \quad (1.2.36)$$

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:

$$\delta P_x = 2p \sin \epsilon. \quad (1.2.37)$$

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

$$\delta x \delta P_x = \frac{h}{2p \sin \epsilon} 2p \sin \epsilon = h. \quad (1.2.38)$$

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

$$\delta x \delta P_x > \mathcal{O}(h). \quad (1.2.39)$$

A határozatlansági elv egyik fontos következménye, hogy nem létezik az elektron sebessége abban az értelemben, ahogyan azt a klasszikus mechanikában szoktuk értelmezni. Tegyük fel, hogy egymást követő τ időközönként leolvassuk az elektron helyzetét. Minél kisebbre választjuk a τ időtartam hosszát, annál pontosabban nyomon fogjuk követni az elektron helyét. Ez azonban azt fogja jelenteni, hogy egyre

nagyobbnak fogjuk találni az impulzusának bizonytalanságát. Ezért a $\vec{v} = \vec{p}/m$ képlet alapján kapott sebesség egyre bizonytalanabb lesz. Fordítva, ha egyre kisebb időtartamonként próbáljuk meg leolvasni az elektron impulzusát, egyre 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

$$\Delta p_i \Delta x_i > \mathcal{O}(\hbar), \quad (1.2.40)$$

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

- *Egyidejűleg mérhető és nem mérhető mennyiségek*

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 az állapottéren skalárszorzatot vettünk 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 mely önadjungált 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 $\hat{f}$ operátora 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 sajátvektorrendszere 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

$$[\hat{f}, \hat{g}] \equiv \hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} = 0 \quad (1.2.41)$$

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

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

- *A határozatlansági elv és a Heisenberg-féle kanonikus csererelációk*

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 sajátvektorrendszere. Ez azt jelenti, hogy a $[\hat{x}, \hat{p}_x]$ kommutátor nem zérus:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] \neq 0. \quad (1.2.42)$$

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:**

$$\Delta f = \left[\langle \psi | \left(\hat{f} - \langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle \right)^2 | \psi \rangle \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (1.2.43)$$

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

$$\Delta x \Delta p_x \gtrsim \hbar \quad (1.2.44)$$

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

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 önadjungált operátorokat, hogy a kanonikusan konjugált helyzetvektor- és impulzuskomponensekre a**

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}_x] &= i\hbar, & [\hat{y}, \hat{p}_y] &= i\hbar, & [\hat{z}, \hat{p}_z] &= i\hbar, \\ [\hat{x}, \hat{y}] &= [\hat{x}, \hat{z}] = [\hat{y}, \hat{z}] = 0, \\ [\hat{p}_x, \hat{p}_y] &= [\hat{p}_x, \hat{p}_z] = [\hat{p}_y, \hat{p}_z] = 0 \end{aligned} \quad (1.2.45)$$

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.

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, erre alább még visszatérünk.)

- *A határozatlansági reláció*

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

$$\left(\xi \hat{x} + \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x \right) |\psi\rangle \quad (1.2.46)$$

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

$$\begin{aligned} 0 \leq I(\xi) &\equiv \left\| \left(\xi \hat{x} + \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x \right) |\psi\rangle \right\|^2 = \langle \psi | \left(\xi \hat{x} - \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x \right) \left(\xi \hat{x} + \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x \right) | \psi \rangle \\ &= \xi^2 \langle \psi | \hat{x}^2 | \psi \rangle + \xi \frac{i}{\hbar} \langle \psi | [\hat{x}, \hat{p}_x] | \psi \rangle + \frac{1}{\hbar^2} \langle \psi | \hat{p}_x^2 | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (1.2.47)$$

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

$$\langle \psi | \hat{x}^2 | \psi \rangle = (\Delta x)^2, \quad \langle \psi | \hat{p}_x^2 | \psi \rangle = (\Delta p_x)^2. \quad (1.2.48)$$

Az egyenlőtlenség tehát

$$0 \leq \xi^2(\Delta x)^2 - \xi + \frac{1}{\hbar^2}(\Delta p_x)^2 \quad (1.2.49)$$

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

$$1 - 4(\Delta x)^2 \frac{1}{\hbar^2}(\Delta p_x)^2 \leq 0 \quad (1.2.50)$$

egyenlőtlenség teljesüljön, ahonnan

$$(\Delta x)(\Delta p_x) \geq \frac{1}{2}\hbar \quad (1.2.51)$$

alakban megkapjuk a határozatlansági relációt. Ezt akartuk belátni.

Megjegyezzük, hogy a (1.2.51) határozatlansági reláció akkor is fennáll, ha nem kötjük ki, hogy $\bar{x} = 0$ és $\bar{p}_x = 0$. A fenti bizonyítás változatlanul elismételhető, ha a kiindulásul vett (1.2.46) vektorban a $\hat{x} \rightarrow \hat{x} - \bar{x}$ és $\hat{p}_x \rightarrow \hat{p}_x - \bar{p}_x$ helyettesítéssel élünk.

- *Részecskerendszer kvantálása*

Amennyiben a fizikai rendszer nem egyetlen pont részecskéből 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 a $j, k, \dots = 1, 2, 3$ index a vektoroperátorok megfelelő Descartes-komponenseit, akkor az $\hat{\vec{r}}_a$ helyzetvektor- és a $\hat{\vec{p}}_a$ impulzus-operátorokra vonatkozó kanonikus csererelációk az alábbiak:

$$[\hat{x}_{a,j}, \hat{p}_{b,k}] = i\hbar \delta_{a,b} \delta_{j,k}. \quad (1.2.52)$$

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 adja¹².

¹²Az f fizikai mennyiség változóinak analitikus függvénye a klasszikus mechanikában. A megfelelő $\hat{f}$ operátor egyértelműsítése a klasszikus Taylor-sor koordináta- és impulzus-komponenseket szorzatalakban tartalmazó tagjainak egyértelmű operátorosítását követeli meg, amiről az ún. Weyl-féle rendezéssel lehet gondoskodni.

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 első egyike volt, aki kigondolta az általános relativitáselmélet és az elektromágnesség törvényeinek egy lehetséges kombinálását.

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 önadjungált operátorait úgy kell megválasztani, hogy a Heisenberg-féle csererelációk kielégüljenek. Fontos arra ügyelni, hogy az így bevezetett operátorok valóban önadjungáltak legyenek a Hilbert-téren értelmezett belső szorzatra nézve.

- *Általános koordinátákkal jellemzett klasszikus mechanikai rendszer kanonikus kvantálása*

A kanonikus kvantálást fentebb olyan esetben mutattuk be, amikor a klasszikus rendszer konfigurációs terében az egyes részecskék Descartes-koordinátáit használtuk. A kanonikus kvantálást azonban akkor is elvégezhetjük, ha a klasszikus mechanikai rendszer konfigurációs terében tetszőleges általános koordinátákat használunk. Az s szabadsági fokú klasszikus mechanikai rendszer térbeli elhelyezkedését, konfigurációját a $(q_1, q_2, \dots, q_s)$ általános koordináták határozzák meg, amelyek egy pontot jelölnek ki az s -dimenziós konfigurációs térben. A klasszikus mechanikai rendszer állapotát az s darab általános koordináta értéke és a hozzájuk kanonikusan konjugált $p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ ($i = 1, 2, \dots, s$) impulzusok határozzák meg, ahol $L(q_1, \dots, q_s, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_s, t)$ a fizikai rendszer Lagrange-függvénye és $\dot{q}_i \equiv \frac{dq_i}{dt}$ ($i = 1, 2, \dots, s$) az általános sebességek. A $2s$ darab adatot tartalmazó $(q_1, \dots, q_s, p_1, \dots, p_s)$ adatsor teljesen meghatározza a fizikai rendszer állapotát, és kijelöl egy pontot a $2s$ -dimenziós fázistérben. Az állapot időbeli változását a $2s$ darab Hamilton-egyenlet,

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (i = 1, 2, \dots, s) \quad (1.2.53)$$

írja le, ahol $H(q_1, \dots, q_s, p_1, \dots, p_s) = \sum_{i=1}^s \dot{q}_i p_i - L$ a Hamilton-függvény, ahol az egyenlőség jobb oldalán szereplő $\dot{q}_i$ általános sebességeket kifejezzük a p_i -ket definiáló összefüggésekből, mint az általános sebességek függvényeit. (Fel van téve, hogy ez megtehető, mert a Lagrange-függvény az általános sebességeknek konvex függvénye.) A Hamilton-egyenleteknek egyértelműen létezik az adott $\{q_{i0} \equiv q_i(0), p_{i0} \equiv p_i(0) | i = 1, \dots, s\}$ kezdeti feltételhez tartozó megoldása:

$$q_i(t) = q_i(t; q_{10}, \dots, q_{s0}, p_{10}, \dots, p_{s0}), \quad p_i(t) = p_i(t; q_{10}, \dots, q_{s0}, p_{10}, \dots, p_{s0}) \\ (i = 1, 2, \dots, s). \quad (1.2.54)$$

A fizikai mennyiségek a fázistéren értelmezett $f(q_1, \dots, q_s, p_1, \dots, p_s; t)$ analitikus függvények, amelyek esetleg explicit módon is függhetnek a t időtől. A fizikai mennyiségek értéke időben változik a rendszer mozgása során: ha behelyettesítjük a mozgásegyenletek (1.2.54) megoldását f argumentumába, akkor azt találjuk, hogy az f mennyiség idő szerinti teljes deriváltja

$$\frac{df}{dt} = \{f, H\}_P + \frac{\partial f}{\partial t}, \quad (1.2.55)$$

ahol $\{.,.\}_P$ a Poisson-zárójel. Legyenek f és g tetszőleges fizikai mennyiségek, akkor definíció szerint

$$\{f, g\}_P = \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial g}{\partial q_i} \frac{\partial f}{\partial p_i} \right). \quad (1.2.56)$$

Az analitikus függvények halmaza a Poisson-zárójelre, mint binér műveletre nézve algebrát alkot. Az általános koordináták és a hozzájuk kanonikusan konjugált impulzusok Poisson-zárójeles kifejezései:

$$\{q_i, q_j\}_P = \{p_i, p_j\}_P = 0, \quad \{q_i, p_j\}_P = \delta_{i,j}, \quad (1.2.57)$$

ahol $\delta_{i,j}$ a Kronecker-delta.

A kanonikus kvantálás során az általános koordinátákat és a hozzájuk kanonikusan konjugált impulzusokat úgy tesszük operátorokká, hogy előírjuk a Heisenberg-féle egyidejű csererelációkat:

$$[\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad [\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{i,j} \quad (i, j = 1, 2, \dots, s), \quad (1.2.58)$$

ahol az utolsó egyenlőség jobb oldalán az i imaginárius egység szerepel szorzóként. Az $f(q_1, \dots, q_s, p_1, \dots, p_s)$ klasszikus fizikai mennyiségeknek megfelelő operátorokat az $\hat{f} = f(\hat{q}_1, \dots, \hat{q}_s, \hat{p}_1, \dots, \hat{p}_s)$ utasítással definiálhatjuk, amennyiben ezek nem tartalmaznak olyan kifejezéseket, amelyekben koordináta és hozzá kanonikusan konjugált impulzus szorzódik, mint pl. $q_i p_j$. Tekintve, hogy a megfelelő operátorok szorzása nem kommutatív, $\hat{q}_i \hat{p}_i \neq \hat{p}_i \hat{q}_i$, azért ilyen esetben a sorrendről rendelkezni kell. A Weyl-féle operátorrendezés értelmében a $q^k p^l$ (k, l pozitív egész számok) szorzatnak megfelelő operátort úgy kapjuk meg, hogy összeadjuk az összes, különböző sorrendű k darab $\hat{q}_i$ tényezőt és l darab $\hat{p}_i$ tényezőt tartalmazó szorzatot, majd az összeget osztjuk a tagok számával. Az így kapott operátor teljesen szimmetrizált kifejezése a k darab $\hat{q}_i$ tényezőt és l darab $\hat{p}_i$ tényezőt tartalmazó összes lehetséges szorzatoknak. Pl. $q_i p_i$ -nek az $\frac{1}{2}(\hat{q}_i \hat{p}_i + \hat{p}_i \hat{q}_i)$, $q_i p_i^2$ -nek az $\frac{1}{3}(\hat{q}_i \hat{p}_i^2 + \hat{p}_i \hat{q}_i \hat{p}_i + \hat{p}_i^2 \hat{q}_i)$ operátor felel meg.

A kvantálás matematikai szempontból azt jelenti, hogy a fizikai mennyiségek Poisson-zárójeles algebráját a Poisson-zárójeleknek a Heisenberg-féle csererelációkkal történő helyettesítésével operátor-algebrává tettük, az absztrakt Hilbert-tér felett ható önadjungált operátorok algebrájává.

- *A megfeleltetési elv*

A Heisenberg-féle csererelációk tulajdonképpen a megfelelő klasszikus mechanikai rendszerben érvényes, egyidejű Poisson¹³-zárójelek,

$$\{q_i, p_j\}_P = \delta_{i,j}, \quad \{q_i, q_j\}_P = 0, \quad \{p_i, p_j\}_P = 0 \quad (1.2.59)$$

¹³Siméon 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 kvantálásán alapuló, Heisenberg-féle megfogalmazásának.

kvantummechanikai megfelelői, ahol a megfeleltetés a klasszikus mechanikai rendszer és a kvantummechanikai rendszer között az alábbi táblázatban foglalható össze. (A táblázat utolsó sorának utolsó oszlopában szereplő W alsó

Klasszikus rendszer	$\longrightarrow$	Kvantummechanikai rendszer
q_i	$\rightarrow$	$\hat{q}_i$
p_i	$\rightarrow$	$\hat{p}_i$
$\{.,.\}_P$	$\rightarrow$	$\frac{1}{i\hbar}[\cdot,\cdot]$
$f(q_1, \dots, q_s, p_1, \dots, p_s)$	$\rightarrow$	$\hat{f} = f(\hat{q}_1, \dots, \hat{q}_s, \hat{p}_1, \dots, \hat{p}_s) _W$

index az esetleg szükséges Weyl-rendezésre utal.)

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

- „Igazi” kvantumfizikai rendszerek

Végezetül még megjegyezzük, hogy léteznek olyan fizikai mennyiségek, amelyeknek nincsen klasszikus mechanikai megfelelőjük, továbbá vannak olyan kvantummechanikai rendszerek, amelyeknek ugyancsak nincsen klasszikus mechanikai megfelelőjük. Ilyenkor a rendszer leírására alkalmas operátorokat nem tudjuk megfelelő klasszikus mennyiségek „kvantálásával” megkapni. Ilyenkor további fizikai és matematikai megfontolásokra van szükségünk, hogy a klasszikus megfelelővel nem rendelkező fizikai mennyiségek operátorait bevezessük, ld. például a spin esetét.

- *Stone és Neumann tétele

A klasszikus mechanikai rendszer kvantálásakor a klasszikus fizikai mennyiségek Poisson-algebráját az absztrakt Hilbert-téren értelmezett operátorok algebrájára cseréltük. Felmerül a kérdés, hogy egyértelműen lehet-e ezt az operátor-algebrát valamilyen függvények Hilbert-tere felett ható operátorokkal ábrázolni. A kérdés azért fontos, mert esetleg többféle kvantummechanikát is kaphatunk, ha lényegileg különböző többféle ilyen ábrázolás is lehetséges. Mivel azonban az unitér transzformációk a Hilbert-tér vektorait a skalárszorzat (és így a norma) megőrzésével kölcsönösen egyértelműen képezik le a Hilbert-térre, ezért az ábrázolás egyértelműségének elvárását enyhíthetjük arra, hogy a lehetséges ábrázolások unitér-ekvivalensek legyenek. A Stone¹⁴-Neumann-tétel azt állítja, hogy a véges szabadsági fokú rend-

¹⁴Marshall Harvey Stone, amerikai matematikus, 1903-1989.

szerek kvantummechanikája egyértelmű, mert az operátor-algebra unitér-ekvivalencia erejéig egyértelműen ábrázolható konkrét Hilbert-tér felett ható operátorokkal.

2. MOZGÁSEGYENLETEK A KVANTUM-MECHANIKÁBAN

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

2.1. Az állapotvektor időfüggése

A kvantumfizikai rendszer állapotának időbeli változását kézenfekvő úgy elképzelni, hogy az (1-re normált) állapotvektor változik az időben. Ezt a Hilbert-téren futó irányított görbeszakasszal szemléltethetjük. A dinamikai változásnak van egy másik matematikai leírási módja: ha $|\psi_0\rangle$ a rendszer állapota a $t = 0$ időpillanatban és $|\psi(t)\rangle$ a rendszer állapota a tetszőleges t időpillanatban, akkor értelmezhetünk olyan lineáris leképezést, amelyik úgy képezi le a Hilbert-teret önmagára, hogy tetszőleges $|\psi_0\rangle$ kezdeti állapotot abba a $|\psi(t)\rangle$ állapotba képez le, amibe az adott kezdeti állapot t idő alatt fejlődik. Az így értelmezett operátor az időfejlesztő operátor, másik nevén evolúciós operátor. Alább látni fogjuk a kapcsolatot a dinamika kétféle leírása között. Megmutatjuk, hogy az evolúciós operátor időtől függő unitér operátor. Az evolúciós operátor is és az időtől függő állapotvektor is eleget tesz egy-egy mozgásegyenletnek, amelyek az úgynevezett Schrödinger¹⁵-egyenletnek különböző alakjai. Megismerkedünk a Hamilton-operátorral¹⁶, 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,

¹⁵Az 1933. évi fizikai Nobel-díjat egyenlő arányban megosztva ítélték oda Erwin Schrödingernek (1887-1961, osztrák) és Paul Adrien Maurice Diracnak (1902-1984, angol) az atomi elmélet, a kvantummechanika új produktív alakjainak felfedezéséért.

¹⁶Az 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.

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

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

egyenletnek kell fennállnia az időtől függő állapotvektorra nézve. **Ez az állapotvektorra vonatkozó Schrödinger-egyenlet, a benne szereplő $\hat{H}(t)$ operátort Hamilton-operátornak nevezzük**¹⁷. 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

¹⁷Az 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.

δt időtartam esetén írhatjuk, hogy

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

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

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

differenciálegyenletet¹⁸, 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 időtől¹⁹. Mivel a Hamilton-operátor lineáris operátor, azért a (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**

¹⁸A „bra”-vektorra vonatkozó Schrödinger-egyenletből hasonlóan kapjuk az evolúciós operátor t_0 -függésére az alábbi differenciálegyenletet:

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

¹⁹Ha 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.

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: $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$.²⁰

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

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

ahonnan

$$\hat{H}^\dagger = \hat{H} \quad (2.1.16)$$

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

²⁰Az $\hat{U}$ 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.

vizsgált fizikai rendszer $|\psi_P\rangle$ állapotvektora a fényfelvillanás objektív pillanatában, mint az idő függvénye

$$|\psi_P\rangle = |\psi(t_P)\rangle = |\psi'(t'_P)\rangle \quad (2.1.17)$$

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

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

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

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

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-operátora²¹, amelynek várható értéke a rendszer energiája és amely pontosan megmondja, hogy mi az a fizikai rendszer, amelyet vizsgálunk.**

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.

²¹Valójában 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 csak a vizsgált rendszer szabadsági fokait tartalmazza és mégis számot ad annak környezettel való kölcsönhatásáról.

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:

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

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

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

$$[\hat{f}, \hat{H}] = 0. \quad (2.2.2)$$

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

$$\dot{\hat{f}} \equiv \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{f}] + \frac{d}{dt} \hat{f}(t). \quad (2.2.3)$$

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

$$\dot{\hat{x}} \equiv \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] \quad (2.2.4)$$

operátort tekinthetjük a v_x sebességkomponens operátorának, mivel $\hat{x}$ nem függ explicit módon az időtől. 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 leszámaztatott mennyiségek kvantummechanikai megfelelőit a (2.2.3) szabállyal tudjuk konzisztens módon értelmezni.

Az f fizikai mennyiség akkor és csak akkor megmaradó, azaz a várható értéke tetszőleges állapotban akkor és csak akkor állandó az időben, ha az f mennyiséghez tartozó $\hat{f}$ operátor azonosan zérus, azaz ha teljesül, hogy²²

$$\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{f}] + \frac{d}{dt}\hat{f}(t) = 0. \quad (2.2.5)$$

2.3. Stacionárius állapotok

2.3.1. A stacionárius állapot fogalma és időfüggése

Tegyük fel, hogy a rendszer Hamilton-operátora nem függ az időtől explicit módon. **A stacionárius állapotok az időtől független Hamilton-operátor sajátállapotai.** Ezeket az jellemzi, hogy az időtől csak egy egységnyi abszolút értékű komplex fázisfaktor révén függenek.

Tekintsük a Schrödinger-egyenletet,

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

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

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

Mivel $\hat{H}$ hermitikus operátor, azért tudjuk, hogy a sajátértékek valósak, a sajátvektorok 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 diszkrét, továbbá, hogy a sajátértékek nem elfajultak.) Ekkor

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

és a stacionárius állapotokra felírt Schrödinger-egyenlet

$$i\hbar\partial_t|\psi_n(t)\rangle = E_n|\psi_n(t)\rangle \quad (2.3.4)$$

alakot ölt, amelynek a megoldása

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

²²A jegyzetben a kvantummechanikai folyamatok olyan leírásmódját használjuk, amikor a kvantumrendszer időbeli változását az állapotvektorának az időfüggése írja le. Ez az úgynevezett Schrödinger-kép. Ebben a tárgyalásmódban a fizikai mennyiségek operátorai csak akkor függenek az időtől, ha ezt külső beavatkozás okozza. A bevezetett $\hat{f}$ operátor nem derivált operátor, és az explicit időfüggés szerinti deriválás $d\hat{f}/dt$ vagy $\partial\hat{f}/\partial t$ jelölése nem okoz zavart.

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,

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

a Hamilton-operátornak éppen az a sajátértéke, amelyhez a stacionárius állapot, mint sajátvektor tartozik²³.

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 véges energiájú 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 energiáknak**.

2.3.2. Fizikai mennyiségek várható értéke stacionárius állapotban

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

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

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.

²³Előfordulhat, hogy valamely E_n energiasajátértékhez $d_n > 1$ dimenziós altér tartozik az állapottérben, amelynek vektorai mind ugyanahhoz az energiasajátértékhez tartozó sajátvektorok. Ilyenkor azt mondjuk, hogy az energiasajátérték, ill. a neki megfelelő energiaszint **elfajult** (degenerált), mégpedig annyiszorosan, amennyi az adott energiasajátértékhez 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.

3. ALAPVETŐ FIZIKAI MENNYISÉGEK

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

3.1. Az állapotok és az operátorok ábrázolása

3.1.1. Ismétlés: fizikai mennyiségek

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

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

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 át²⁴. Ha a tetszőleges $|\psi\rangle$ állapotú rendszeren elvégezzük az f fizikai mennyiség mérését, akkor valamelyik f_n sajátértéket kapjuk eredményül. Ha nagyon sokszor, egymástól függetlenül ismételjük meg az f mérését jelentő kísérletet, az ugyanazon rendszernek ugyanabban a $|\psi\rangle$ állapotban levő „másolataink” végezzük el az f mérését, akkor bizonyos relatív gyakoriságokkal kapjuk az egyes lehetséges f_n értékeket, mint mérési eredményeket az egyes egyedi kísérletekben. A kísérletek számával végtelenhez tartva, ezek a relatív gyakoriságok meghatározott határértékekhez, a $w_n = |c_n|^2$ valószínűségekhez tartanak. Az állapot normáltsága biztosítja, hogy az összes lehetséges eredmény valószínűségeinek összege 1. Azt mondjuk ilyenkor, hogy az f mennyiségnek a $|\psi\rangle$ állapotban az értéke az

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

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 egyedi f_n mérési eredmények szórása általában jelentős, ezt az f mennyiség bizonytalanságának, vagy határozatlanságának nevezzük:

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

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

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

ahonnan

$$\hat{1} = \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n|. \quad (3.1.9)$$

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

²⁴Az egyszerűség kedvéért tekintünk el attól az esettől, amikor a sajátértékek elfajultak és egynél nagyobb dimenziós sajátaltérek tartoznak hozzájuk. A fentieknek erre az esetre történő általánosítása kézenfekvő, de meghaladja a jelen jegyzet kereteit. Ugyancsak nem fogunk annak az esetnek a finom matematikai elemzésével foglalkozni, amikor a sajátértékek folytonosak és a véges normájú állapotok definíciója mélyebb megfontolást igényel.

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

$$\hat{f}|\psi_{f'}\rangle = f'|\psi_{f'}\rangle \quad (3.1.10)$$

sajátértékegyenletnek vannak megoldásai, s azok ortonormált teljes rendszert alkotnak a

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

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

$$|\psi\rangle = \int_{I_f} df' c_{f'} |\psi_{f'}\rangle, \quad c_{f'} = \langle \psi_{f'} | \psi \rangle \quad (3.1.12)$$

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

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

Az egységfelbontás

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

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

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

a szórása pedig

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

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

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

3.1.2. Az állapottér vektorainak lineáris ábrázolása

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

1. **Legyen lineáris**, hogy a lineáris szuperpozíció elvével összhangban legyen, azaz szuperponált állapot hullámfüggvénye a szuperpozícióban résztvevő állapotok hullámfüggvényeinek ugyanolyan együtthatókkal vett lineáris kombinációja legyen.
2. **Tartsa meg a skalárszorzatot**, hogy az átmeneti amplitudók és valószínűségek, ill. a fizikai mennyiségek várható értékei ne változzanak.
3. **Tartsa meg a Heisenberg-féle egyidejű csererelációkat**, amelyek a kvantálás szabályai. Ez a követelmény az előzőekből következően már teljesül.

Az állapottér ábrázolása a következőképpen történik:

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

$$\hat{F}|F\rangle = F|F\rangle, \quad \langle F'|F\rangle = \delta_{F,F'} \quad (3.1.18)$$

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

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

$$|\psi\rangle = \sum_F c_F |F\rangle, \quad c_F = \langle F|\psi\rangle, \quad (3.1.19)$$

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

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

$$c_F = \langle F|\psi \rangle \equiv \psi(F) \quad (3.1.20)$$

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

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

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

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

Ez folytonos F értékek esetén azt jelenti, hogy

$$\int dF |\psi(F)|^2 = 1, \quad (3.1.22)$$

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

4. Két tetszőleges

$$|\psi\rangle = \sum_F c_F |F\rangle, \quad |\phi\rangle = \sum_F b_F |F\rangle \quad (3.1.23)$$

állapotvektor skaláris szorzata

$$\langle \psi|\phi \rangle = \sum_{F',F} c_{F'}^* b_F \langle F'|F \rangle = \sum_F c_F^* b_F \quad (3.1.24)$$

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

$$\langle \psi|\phi \rangle = \sum_F \psi^*(F) \phi(F) \quad (3.1.25)$$

diszkrét spektrumú F mennyiség esetén, ill.

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

folytonos spektrumú F mennyiség esetén.

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

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

Ezt az alábbiakból látjuk:

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

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

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

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

- (b) Tetszőleges f fizikai mennyiség várható értéke

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

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

$$f_{F',F} = \langle F' | \hat{f} | F \rangle \quad (3.1.31)$$

mátrix segítségével.

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

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

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

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

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

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

azaz az U mátrix adjungáltja azonos az U mátrix inverzével.

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

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

$$\psi(G) = \langle G|\psi\rangle = \sum_F \langle G|F\rangle \langle F|\psi\rangle = \sum_F \langle G|F\rangle \psi(F). \quad (3.1.34)$$

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

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

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

A fentieket összegezve, az állapottér F -ábrázolása az alábbi megfeleltetést jelenti: A hullámfüggvény értelmezési tartománya az F fizikai mennyiség spektru-

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

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

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

$$\langle F'|\hat{F}|F\rangle = F\langle F'|F\rangle = F\delta_{F',F}, \quad (3.1.36)$$

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

A fenti, lineáris ábrázolás fontos következményei,

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

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

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

$$\hat{O} = 0 \implies \langle F|\hat{O}|F'\rangle = O_{F,F'} = 0. \quad (3.1.37)$$

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

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

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

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

azaz

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

3.2. A hullámfüggvény koordináta-reprezentációban

3.2.1. Pontrészecske

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

$$|\psi\rangle \leftrightarrow \psi(x, y, z) = \langle x, y, z | \psi \rangle \quad (3.2.1)$$

három-változós függvény²⁵. Itt $|x, y, z\rangle$ olyan állapotvektor, amely a Descartes-koordináták $\hat{x}$, $\hat{y}$ és $\hat{z}$ operátorainak közös sajátvektora:

$$\hat{x}|x, y, z\rangle = x|x, y, z\rangle, \quad \hat{y}|x, y, z\rangle = y|x, y, z\rangle, \quad \hat{z}|x, y, z\rangle = z|x, y, z\rangle, \quad (3.2.2)$$

amit tömören így jelölhetünk:

$$\hat{\vec{r}}|\vec{r}\rangle = \vec{r}|\vec{r}\rangle. \quad (3.2.3)$$

Ekkor az állapotvektorok skalárszorzata,

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

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

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

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

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

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

$$dw(\vec{r}) \equiv |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz = |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} \quad (3.2.7)$$

infinitezimális mennyiség annak a $dw(\vec{r})$ valószínűsége, 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, hogy a részecske az egész térben valahol bizonyosan, azaz 1 valószínűséggel megtalálható.

²⁵Ha $\mathcal{F}$ jelöli a négyzetesen integrálható egy-változós $f(x)$ függvények terét, akkor a $\psi(x, y, z)$ hullámfüggvény az $\mathcal{F} \otimes \mathcal{F} \otimes \mathcal{F}$ tenzori szorzattér eleme, mint 3-változós, négyzetesen integrálható függvény.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

follytonos indexű diagonális mátrix ábrázolja a koordináta-reprezentációban, azaz

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

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

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

3.3. A helykoordináta és az impulzus

3.3.1. A helykoordináta operátorának sajátérték-egyenlete

Koordináta-reprezentációban a Descartes-koordináta operátorát a

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

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

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

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

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

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

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

hiszen

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

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

$$\int dx \psi_{x'_0}^*(x) \psi_{x_0}(x) = \delta(x_0 - x'_0), \quad (3.3.6)$$

ugyanis

$$\int dx \delta(x - x'_0) \delta(x - x_0) = \delta(x_0 - x'_0) \int dx \delta(x - x_0) = \delta(x_0 - x'_0). \quad (3.3.7)$$

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

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

ahol

$$\psi(x') = \int_x \psi_x^*(x) \psi(x) \quad (3.3.9)$$

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

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

$$\hat{1} = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 |x_0\rangle \langle x_0|, \quad (3.3.10)$$

hiszen ennek mátrixa a koordináta-sajátvektorok bázisában éppen

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

3.3.2. Az impulzus Descartes-komponensének operátora

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

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

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

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

Behelyettesítve a koordináta-operátor ismert mátrixelemét,

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

azaz

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

adódik. Ennek a megoldása

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

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

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

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

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

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

A 3-dimenziós térben a részecske impulzusvektora minden Descartes-komponensének hasonló alakú differenciáloperátor felel meg, amelyeket vektoralakban foglalhatunk össze²⁶:

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

3.3.3. Az impulzus Descartes-komponense operátorának sajátfüggvényei

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

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

A válasz most is hasonló, mint a koordináta-sajátfüggvények keresése esetén: a véges normájú függvények között nem találunk ilyen sajátfüggvényt. Ez azt jelenti, hogy szigorúan véve nincsen olyan fizikai állapot, amikor az impulzus Descartes-komponense jól meghatározott értékkel rendelkezik. **A kibővített függvények terében azonban találhatunk olyan, nem véges normájú, általánosított értelemben vett függvényeket, amelyek sajátfüggvényei az impulzus Descartes-komponense operátorának:**

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

²⁶Korábban megtanultuk, hogy a nabla-operátor olyan „vektor-operátor”, amelynek Descartes-komponensei rendre a

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

differenciál-operátorok.

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

$$\langle x' | x \rangle = \delta(x' - x) \quad (3.3.3)$$

normálási feltétellel és az egység-felbontás konvencionális

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

alakjával, ezért választásunk

$$\mathcal{N} = 1. \quad (3.3.5)$$

Valóban,

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

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

Az

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

impulzus-sajátfüggvények kielégítik az alábbi **általánosított ortonormáltsági fel-tételt**:

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

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

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

ahol

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

Ha a szimbólikus

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

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

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

alak adódik. Az általánosított ortonormáltsági relációt

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

alakban felhasználva, a hullámfüggvény impulzus-reprezentációban:

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

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

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

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

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

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

vektoralakban foglalhatók össze. A megoldásaik pedig a

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

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

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

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

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

helytől független állandó. Ezért ezek nem fizikai állapotok hullámfüggvényei. Ha azok lennének, az azt jelentené, hogy az általuk leírt részecske a térben mindenütt azonos valószínűséggel lenne jelen. A részecskét nem lehet olyan állapotban előállítani, amelyben az impulzusa élesen meghatározott. A határozatlansági reláció elvi korlátot jelent ebben. A valóságos részecskék, amelyeket a gyorsítók előállítanak, soha sincsenek impulzus-sajátállapotban. A legjobb, ami előfordulhat, hogy olyan hullámcsomagok, amelyekben egy adott impulzus-sajátfüggvény fordul elő a legnagyobb amplitudóval. Erre még visszatérünk, amikor a hullámcsomagokról fogunk beszélni.

Az impulzus-sajátfüggvények teljesítik az általánosított ortonormáltsági relációt,

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

és a teljességi relációt,

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

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

3.3.4. Az impulzusoperátor jelentése

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\langle \phi | \hat{H} | \psi \rangle = \langle \phi' | \hat{H}' | \psi' \rangle \quad (3.3.4)$$

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

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

rendre a megfelelő állapotvektorok az infinitezimálisan eltoló K' koordináta-rendszerben. Innen a Hamilton-operátor transzformációja infinitezimális eltolás során

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

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

$$[\hat{\vec{p}}, \hat{H}] = 0. \quad (3.3.7)$$

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

3.4. A koordináta-hullámfüggvény valószínűségi jelentése

A Schrödinger-egyenlet alapján könnyen meggyőződhetünk a koordináta-hullámfüggvény valószínűségi jelentéséről²⁷: **a találati valószínűségre kontinuitási egyenletet írhatunk fel.**

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

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

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

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

²⁷Max Bornnak (1882-1970, német) ítéltek oda felerészben az 1954. évi fizikai Nobel-díjat a kvantummechanikában végzett alapvető jelentőségű kutatásaiért, különös tekintettel a hullámfüggvény általa adott statisztikus interpretációjára. A díj másik részében Walther Bothe (1891-1957, német) részesült az általa kifejlesztett koincidencia-módszerért és azokért a felfedezésekért, amelyeket evvel a módszerrel tett.

Használjuk fel, hogy koordináta-reprezentációban

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

ekkor az egyenlet jobb oldala

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

A következő egyenletet kapjuk tehát:

$$\frac{d}{dt} \int_V dV \psi^* \psi = \frac{i\hbar}{2m} \int_V dV \operatorname{div} [\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*]. \quad (3.4.5)$$

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

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

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

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

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi^* \psi - \frac{i\hbar}{2m} \operatorname{div} [\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*] = 0. \quad (3.4.7)$$

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0. \quad (3.4.8)$$

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,

$$\int dV \psi^* \psi = 1, \quad (3.4.9)$$

és ρ értéke nem negatív a tér tetszőleges pontjában, tetszőleges időpillanatban:

$$\rho = \psi^* \psi = |\psi|^2 \geq 0. \quad (3.4.10)$$

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

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

Stacionárius állapotban a részecske időtől függő koordináta-hullámfüggvénye mindig $\psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ alakú, ahol E a stacionárius állapot energiája. Ezért stacionárius állapotban mind a $\rho(\vec{r})$ valószínűségi sűrűség, mind a $\vec{j}(\vec{r})$ valószínűségi áramsűrűség független az időtől, csak a helytől függhet. Ilyen esetben a kontinuitási egyenlet a

$$\text{div} \vec{j} = 0 \quad (3.4.11)$$

alakot ölti. Ha ezt integráljuk egy tetszőlegesen választott (térben rögzített) V térfogatra, akkor azt kapjuk a Gauss-tétel alkalmazásával, hogy

$$\oint_{\partial V} d\vec{f} \vec{j} \vec{n} = 0, \quad (3.4.12)$$

azaz hogy a valószínűségi áramsűrűség fluxusa zérus a V térfogatot határoló ∂V zárt felületen (itt $\vec{n}$ a határfelület külső normálisa).

3.5. A pályaimpulzusmomentum

3.5.1. Pontrészecske pályaimpulzusmomentum-operátorának definíciója

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

mechanikai részecske pályaimpulzusmomentumának operátorát

$$\hat{\mathcal{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \quad (3.5.1)$$

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

$$[\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y] = i\hbar\hat{\ell}_z, \quad [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_x] = i\hbar\hat{\ell}_y, \quad [\hat{\ell}_y, \hat{\ell}_z] = i\hbar\hat{\ell}_x. \quad (3.5.2)$$

Ezeket összefoglalva

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

alakban írhatjuk, ahol

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

A csererelációk

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

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

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

amit tömörebben

$$\hat{\mathcal{L}} = \frac{\hbar}{i} \vec{r} \times \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \quad (3.5.7)$$

alakban is írhatunk.

3.5.2. Pontrészecské pályaimpulzusmomentum-operátorának jelentése

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

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

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

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

3.5.3. Pontrészecské pályaimpulzusmomentumának megmaradása

Megmutatjuk, hogy ha az egy-részecskés fizikai rendszer térbeli elforgatási szimmetriával rendelkezik, akkor a pályaimpulzusmomentuma megmarad²⁸.

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

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

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

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

²⁸Olyan pontrészecskéről van szó, amelynek a helyzetvektorán kívül, azaz a térbeli szabadsági fokain kívül nincsen semmilyen további, belső szabadsági foka. Többek között zérus a spinje.

A (3.5.9) feltétel ezért az alábbi egyenletre vezet,

$$\hat{H} - \hat{H}' = -\frac{i}{\hbar} \delta \vec{\varphi} \cdot \hat{\mathcal{L}} \hat{H} + \hat{H} \frac{i}{\hbar} \delta \vec{\varphi} \cdot \hat{\mathcal{L}}, \quad (3.5.11)$$

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

$$[\hat{\mathcal{L}}, \hat{H}] = 0, \quad (3.5.12)$$

azaz **forgásszimmetrikus, egyetlen (zérus spinű) részecskéből álló rendszer Hamilton-operátora felcserélhető a részecske pályaimpulzusmomentumának az operátorával**²⁹. Mivel a pályaimpulzusmomentum operátora nem függ explicit módon az időtől³⁰, a

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

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

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

3.5.4. A pályaimpulzusmomentum négyzete

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

$$\hat{\mathcal{L}}^2 \equiv \hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 + \hat{\ell}_z^2 \quad (3.5.14)$$

felcserélhető a pályaimpulzusmomentum valamennyi komponensével:

$$[\hat{\mathcal{L}}^2, \hat{\ell}_i] = 0, \quad i = x, y, z. \quad (3.5.15)$$

Képezzük az alábbi kommutátorokat:

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

²⁹Az ilyen rendszer vagy a szabad pont részecske, vagy forgásszimmetrikus külső térben mozgó pont részecske.

³⁰Sem a pályaimpulzusmomentum, sem a Hamilton-operátor nem függ explicit módon az időtől, ha a forgásszimmetrikus külső tér nem függ az időtől.

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

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

Ezzel beláttuk, amit akartunk.

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

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

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

3.5.5. A pályaimpulzusmomentum léptető operátorai

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

$$\hat{\ell}_{\pm} = \hat{\ell}_x \pm i\hat{\ell}_y. \quad (3.5.19)$$

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

$$\hat{\ell}_{\pm}^{\dagger} = \hat{\ell}_{\mp}. \quad (3.5.20)$$

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

$$[\hat{\ell}_+, \hat{\ell}_-] = 2\hbar\hat{\ell}_z, \quad [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_+] = \hbar\hat{\ell}_+, \quad [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_-] = -\hbar\hat{\ell}_-, \quad (3.5.21)$$

Ugyancsak egyszerűen beláthatjuk a következő azonosságot:

$$\hat{\ell}^2 = \hat{\ell}_+ \hat{\ell}_- + \hat{\ell}_z^2 - \hbar\hat{\ell}_z = \hat{\ell}_- \hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_z^2 + \hbar\hat{\ell}_z. \quad (3.5.22)$$

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

$$[\hat{\ell}^2, \hat{\ell}_{\pm}] = 0. \quad (3.5.23)$$

3.5.6. A pályaimpulzusmomentum operátora gömbi polárkoordináta-rendszerben

Ha bevezetjük a részecske helyzetének jellemzésére a gömbi polárkoordinátákat a szokásos

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta \quad (3.5.24)$$

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

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

A pályaimpulzusmomentum négyzetének operátorára ekkor

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

adódik. A későbbiek szempontjából fontos nagyon jól megjegyezni, hogy ez az operátor - a $-\hbar^2$ szorzótényezőtől eltekintve - a $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ Laplace³¹-operátor szögfüggő része:

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

A gömbi polárkoordináták és a Descartes-koordináták közti kapcsolat alapján

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

Innen rögtön adódik, hogy

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

³¹Pierre-Simon Laplace (1749-1827, francia) matematikus és fizikus, tudományos munkássága elsősorban a Naprendszer keletkezésére, az égi mechanikára, továbbá valószínűségszámítási és statisztikai vizsgálatokra irányult. Felfedezte a gravitációs potenciált (bár nem nevezte ezen a néven), és észrevette, hogy az a később róla elnevezett Laplace-egyenletnek tesz eleget.

továbbá, hogy

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

Az pályaimpulzusmomentum négyzete operátorának gömbi polárkoordinátás alakját a fentieket felhasználva az

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

azonosság alapján kapjuk meg:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{L}}^2 &= \hbar^2 e^{i\varphi} \left(\partial_\theta + i \operatorname{ctg} \theta \partial_\varphi \right) \left[e^{-i\varphi} \left(-\partial_\theta + i \operatorname{ctg} \theta \partial_\varphi \right) \right] - \hbar^2 \partial_\varphi^2 + \hbar^2 i \partial_\varphi \\
&= \hbar^2 \left\{ \left(-\partial_\theta^2 - i \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi + i \operatorname{ctg} \theta \partial_\theta \partial_\varphi \right) + i e^{i\varphi} \operatorname{ctg} \theta \partial_\varphi \left[e^{-i\varphi} \left(-\partial_\theta + i \operatorname{ctg} \theta \partial_\varphi \right) \right] - \partial_\varphi^2 + i \partial_\varphi \right\} \\
&= \hbar^2 \left\{ \left(-\partial_\theta^2 - i \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi + i \operatorname{ctg} \theta \partial_\theta \partial_\varphi \right) + i \operatorname{ctg} \theta \left[-i \left(-\partial_\theta + i \operatorname{ctg} \theta \partial_\varphi \right) \right] \right. \\
&\quad \left. + i \operatorname{ctg} \theta \left(-\partial_\theta \partial_\varphi + i \operatorname{ctg} \theta \partial_\varphi^2 \right) - \partial_\varphi^2 + i \partial_\varphi \right\} \\
&= \hbar^2 \left\{ -\partial_\theta^2 - \operatorname{ctg} \theta \partial_\theta - \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi^2 + \frac{\cos^2 \theta + \sin^2 \theta - 1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi \right\} \\
&= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \left(\sin \theta \partial_\theta^2 + \cos \theta \partial_\theta \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi^2 \right] \\
&= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta \left(\sin \theta \partial_\theta \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi^2 \right].
\end{aligned} \tag{3.5.32}$$

3.5.7. A pályaimpulzusmomentum operátorának sajátfüggvényei és sajátértékei

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

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

de bármelyikük felcserélhető a pályaimpulzusmomentum négyzetének operátorával,

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

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

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

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

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

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

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

$$-i\hbar\partial_\varphi Y(\theta, \varphi) = \ell_z Y(\theta, \varphi) \quad (3.5.37)$$

alakot ölt. Keressük ennek megoldását szeparált,

$$Y(\theta, \varphi) = \Phi(\varphi)\Theta(\theta) \quad (3.5.38)$$

alakban. A φ -függő részre a

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

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

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

Vegyük azonban figyelembe, hogy a φ és a $\varphi + 2\pi$ szögű elforgatás egyenértékű, pl. a helyzetvektor a φ és a $\varphi + 2\pi$ szögű elforgatás után ugyanabba a helyzetvektorba

transzformálódik³². Ezért a $\Phi(\varphi)$ hullámfüggvénynek 2π szerint periodikusnak kell lennie, egyébként nem lenne egyértékű. Az egyértékűség feltétele, hogy

$$\ell_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.5.41)$$

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

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

Mielőtt megkeresnénk a pályaimpulzusmomentum 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

$$\hat{\ell}_z |C, m\rangle = \hbar m |C, m\rangle, \quad \hat{\ell}^2 |C, m\rangle = C |C, m\rangle, \quad (3.5.43)$$

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

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

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

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

$$\hat{\ell}_+ |\phi_+\rangle = 0, \quad (3.5.45)$$

azaz a

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

³²Valójában 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 szorozódhatnak 2π elforgatás során. Ez azonban azt jelentené, hogy a hullámfüggvény nem lenne egyértékű. Mélyebb szimmetriamegfontolásokból (csoporthelméleti megfontolásokból) következik, hogy zérus spinű részecske esetén, amelyről hallgatólagosan ezidáig mindig szó volt, a hullámfüggvény csak egyértékű lehet.

egyenlet megoldását. A φ szerinti deriválást elvégezve kapjuk, hogy

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

ahonnan, normálási tényezőtől eltekintve:

$$f(\theta) = \sin^\ell \theta. \quad (3.5.48)$$

Azt is könnyű belátni, hogy a kapott

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

hullámfüggvény az impulzusmomentum négyzetének is sajátfüggvénye:

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

mégpedig a

$$C = \hbar^2 \ell(\ell + 1) \quad (3.5.51)$$

sajátértékhez tartozik. **Az impulzusmomentum négyzetének $\ell \geq 0$ egész számmal jellemzett $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$ sajátértékéhez tartozó állapotok alterében tehát nem lehet az impulzusmomentum vetületének sajátértéke nagyobb, mint $m = \ell$.** Ugyanakkor, ebben az alterben a maximális $m = \ell$ értékhez tartozó $|\phi_+\rangle$ állapotból kiindulva az $\hat{\mathcal{L}}^2$ és az $\hat{\ell}_z$ operátorok közös sajátfüggvényeit mind elő tudjuk állítani, ha rendre egyszer, kétszer, stb. hattatjuk rá a lefelé léptető $\hat{\ell}_-$ operátort. Vezessük be a szokásosabb jelölést, amikor a megfelelő sajátvektorokat az ℓ és m értékével jelöljük. Ekkor $|\phi_+\rangle = |\ell, \ell\rangle$ és

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

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

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

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

egyenlet komplex konjugáltja

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

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

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

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

$$\hat{\ell}_-|\ell, -\ell\rangle = 0. \quad (3.5.56)$$

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

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

a gömbfelületi függvények, a keresett sajátfüggvények. A

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

ortonormáltsági relációt kielégítő gömbfelületi függvények

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

alakúak, ahol $P_\ell^m(\cos\theta)$ az úgynevezett asszociált (hozzárendelt) Legendre-polinokok³³ ($m = 0, 1, \dots, \ell$; $\ell = 0, 1, 2, \dots$), amelyek a

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

ℓ -edrendű Legendre-polinomból a

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

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

A Legendre-polinokok a

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

differenciálegyenletet elégítik ki, az asszociált Legendre-polinokok pedig a

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

³³Adrien-Marie Legendre (1752-1833, francia) matematikus, alapvető fontosságúak számelméleti munkái. Kidolgozta a legkisebb négyzetek módszerét, foglalkozott elliptikus integrálok meghatározásával, az euklideszi geometria alapjaival és módszereivel.

differenciálegyenlet megoldásai. A Legendre-polinomok ortonormáltak, a

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

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

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

Az első néhány gömbfelületi függvény explicit alakja:

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

A gömbfelületi függvények eleget tesznek az alábbi fontos tulajdonságnak

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

3.5.8. Forgásszimmetrikus egy-részecskés rendszer stacionárius állapotai

Már megtanultuk, hogy a pályaimpulzusmomentum operátorának egyes Descartes-komponensei a Descartes-koordinátarendszer megfelelő tengelyei körüli infinitezimális elforgatásokat generálják. Azt is megmutattuk, hogy ha a pont-részecske³⁴ szabad mozgást végez, vagy forgásszimmetrikus külső térben mozog, azaz ha a részecske $\hat{H}$ Hamilton-operátora invariáns a térbeli elforgatásokkal szemben, akkor a Hamilton-operátor felcserélhető a pályaimpulzusmomentum valamennyi Descartes-komponensének az operátorával,

$$[\hat{\ell}_j, \hat{H}] = 0. \quad (3.5.72)$$

Ekkor a pont-részecske $\hat{H}$ 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-részecskés fizikai rendszernek az energiasajátállapotai egyúttal pályaimpulzusmomentum sajátállapotok**. Minden egyes energiaszintet az E energiája mellett az is jellemez, hogy mi a részecske pályaimpulzusmomentuma négyzetének $\hbar^2\ell(\ell+1)$ sajátértéke. A részecske E energiája nyilván csak $\hat{\ell}^2$ sajátértékétől, azaz ℓ értékétől függhet, nem függhet azonban $\hat{\ell}_z$ sajátértékétől, mert az sértené a forgásszimmetriát. Ezért **minden egyes energiaszint $(2\ell+1)$ -szeresen elfajult, mert bármely, adott E energiával és ℓ kvantumszámmal jellemzett energiaszinthez $2\ell+1$ darab lineárisan független, páronként ortogonális állapot tartozik, amelyek a pályaimpulzusmomentum z -irányú vetületének értéke tekintetében különböznek csak egymástól**³⁵. Ezt a $(2\ell+1)$ darab, független állapotot **multiplettnek** nevezzük. **A forgási szimmetria azt eredményezi, hogy az egyes energiaszintekhez állapot-multiplettek tartoznak.**

³⁴Továbbra is $s = 0$ spinű részecskéről beszélünk.

³⁵Általánosságban (a Hamilton-operátor explicit 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.

Arról, hogy a Természetben csakugyan vannak ilyen multiplettek, úgy tudunk meggyőződni, hogy a forgásszimmetriát valamilyen módon „kicsit” megsértjük, és akkor az eredetileg azonos energiasajátértékhez tartozó állapotok „kicsit” különböző energiákhoz fognak tartozni. Némi ügyességgel ezeket a kicsit különböző, energiában nagyon közeli állapotokat tudjuk aztán megfigyelni. **A szimmetria multiplettek révén történő megvalósulását nevezzük a szimmetria Wigner³⁶-féle megvalósulásának.**

3.6. A teljes impulzusmomentum és a spin

3.6.1. A teljes impulzusmomentum

Megtanultuk, hogy a pályaimpulzusmomentum operátora a hullámfüggvény transzformációját generálja a koordináta-rendszer térbeli elforgatásai során. Feltehetjük azt a kérdést, hogy vajon a pályaimpulzusmomentum operátora a legáltalánosabb olyan $\hat{\vec{j}}$ axiálvektor-operátor, amelyik térbeli elforgatásokat generál. Azt kérdezzük, hogy mi az a legáltalánosabb $\hat{\vec{j}}$ operátor, amely általában a Descartes-koordináta-rendszernek a i -edik koordináta-tengely körüli, infinitezimális $\delta\alpha_i$ ($i = 1, 2, 3$) szögű elforgatása során leírja az állapotvektor infinitezimális megváltozását,

$$|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi\rangle - \frac{i}{\hbar} \hat{j}_i \delta\alpha_i |\Psi\rangle. \quad (3.6.1)$$

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

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

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

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

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

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

Forgásszimmetrikus rendszer esetén tehát az elforgatásokat generáló $\hat{\vec{j}}$ operátor megmaradó mennyiség operátora. Azé a megmaradó mennyiségé, amelyik azért marad meg,

³⁶Wigner Jenő (1902-1995, magyar-amerikai) fizikus részesült az 1963. évi fizikai Nobel-díjban felfedezésben, hozzájárulásáért az atommagok és az elemi részek elméletéhez, amelyben jelentős szerepe volt az alapvető szimmetriaelvek felfedezésének és alkalmazásának. Az 1963. évi fizikai Nobel-díj másik felét egyenlő arányban Maria Goeppert-Mayernek (1906-1972, amerikai) és Johannes Hans D. Jensennek (1907-1973, német) ítélték oda az atommagok héjszerkezetére vonatkozó felfedezéseikért.

mert a rendszer forgásszimmetrikus. Definíció szerint ezt a mennyiséget a rendszer teljes impulzusmomentumának nevezzük. A térbeli elforgatások generátorai tehát a teljes impulzusmomentum komponensei. A teljes impulzusmomentum megmaradása tehát azt jelenti, hogy a fizikai rendszer időbeli változása során a $\hat{j}_i$ operátorok várható értékei nem változnak, időben állandók. Ha $|\psi(t)\rangle$ a rendszer időben változó állapotvektora, akkor a forgásszimmetria fennállása esetén

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

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

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

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

sajátérték-egyenleteket elégítik ki.

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

3.6.2. A spin

Mit tettünk ebben a fejezetben eddig? A matematika, pontosabban a csoportelmélet eredményeire hivatkozva megállapítottuk, hogy a fizikai rendszerek teljes impulzusmomentuma elvileg lehet egész és fél-egész értékű. A pályaimpulzusmomentumról a tanultak alapján tudjuk, hogy az egész értékek biztosan megvalósulnak a Természetben. Ugyanakkor a pályaimpulzusmomentumról tanultak alapján azt is beláthatjuk, hogy (belső szerke-

zet nélküli részecske esetén) pályamozgásból nem származhatnak a teljes impulzusmomentum fél-egész értékei³⁷. Az izgalmas kérdés tehát az, hogy megvalósulnak-e a Természerben az impulzusmomentum feles értékei?

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

	Család	Részecske	Spin (S)
Fermionok	Leptonok	Elektron	$\frac{1}{2}$
		Müon	$\frac{1}{2}$
		Tau	$\frac{1}{2}$
		Neutrínók	$\frac{1}{2}$
	Kvarkok	Kvarkok	$\frac{1}{2}$
	Részecske		Spin (S)
Bozonok	Foton		1
	Vektorbozonok ($W^\pm, Z^0$)		1
	Gluonok		1
	Graviton(?)		2

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

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

3.6.3. Az impulzusmomentumok összeadása

Tudjuk, hogy a részecske térbeli mozgása eredményezheti, hogy a részecske pályaimpulzusmomentuma nem zérus. Láttuk, hogy a pályaimpulzusmomentum sajátállapotai $\ell \geq 0$

³⁷Később, az impulzusmomentumok összeadási szabályával megismerkedve majd azt is kijelenthetjük, hogy belső szerkezettel rendelkező részecske fél-egész értékű teljes impulzusmomentuma szintén nem származhat csak pályaimpulzusmomentumok összeadásából. Ha fel is tesszük, hogy a rendszer N darab részecskéből áll, amelyek mozognak a rendszeren belül és nem nulla pályaimpulzusmomentumot hordoznak, akkor is az l_a ($a = 1, 2, \dots, N$) egész értékű impulzusmomentumok összeadása révén csak L egész értékű eredő pályaimpulzusmomentum jöhet létre.

egész értékekkel jellemezhetők. A pályaimpulzusmomentum sajátállapotai megvalósítják a teljes impulzusmomentum egész értékkel jellemzett sajátállapotait. A tapasztalat azonban azt mutatja, hogy a pl. nyugalomban levő elektron két-állapotú rendszer, ami a teljes impulzusmomentum $\frac{1}{2}$ értékéhez tartozó állapotokat valósítja meg, azaz hogy az elektronnak nem pályamozgásból származó, $\hat{\vec{J}}$ sajátimpulzusmomentuma, azaz spinje van. Evvel alább egy külön fejezetben foglalkozunk.

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

1. a teljes impulzusmomentum származhat a részecske pályamozgásából, s ily módon lehet azonos a részecske pályaimpulzusmomentumával (ha a részecske sajátimpulzusmomentuma zérus),
2. a teljes impulzusmomentum származhat a részecske saját impulzusmomentumától, más néven spinjétől (ha a részecske nem végez pályamozgást, azaz $\ell = 0$ sajátállapotban van),
3. a teljes impulzusmomentumhoz egyidejűleg hozzájárulhat a részecske pályaimpulzusmomentuma és spinje.

Felvetődik ezért az a kérdés, hogy hogyan kell a részecske pályaimpulzusmomentuma és spinje segítségével a részecske teljes impulzusmomentumát meghatározni? Később, egynél több részecskét tartalmazó rendszerekben hasonló kérdés úgy is felmerül, hogy hogyan kell két részecske teljes impulzusmomentumából a két-részecskés alrendszer teljes (eredő) impulzusmomentumát meghatározni. A szabály, – **az impulzusmomentumok összeadásának szabálya** – minden esetben ugyanaz, teljesen általános, és a csoportelmélet segítségével lehet levezetni. Alább az impulzusmomentum-összeadás általános szabályát két tetszőleges, $\hat{\vec{J}}_1$ és $\hat{\vec{J}}_2$ impulzusmomentum esetén fogalmazzuk meg. Itt bármelyik $\hat{\vec{J}}_a$ ($a = 1, 2$) jelenthet teljes impulzusmomentumot, pályaimpulzusmomentumot és spint egyaránt.

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

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{J}}_1 + \hat{\vec{J}}_2 \quad (3.6.7)$$

az egyes részei teljes impulzusmomentumai operátorainak az összege³⁸.

³⁸Ennek indoklását a részecskerendszerek teljes impulzusmomentumáról szóló fejezetben adjuk meg.

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

A két „részből” álló rendszer $\psi(1, 2)$ hullámfüggvénye egyidejűleg sajátfüggvénye a $\hat{J}_1^2$ és a $\hat{J}_2^2$ operátoroknak,

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

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

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

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

vel. Ezekre tehát az alábbi sajátérték-egyenletek állnak fenn:

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

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

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

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

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

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

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

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

ahol $(JM|J_1 M_1 J_2 M_2)$ az úgynevezett Clebsch³⁹-Gordan⁴⁰-együtthatók. Értéküket a csoportelmélet módszereivel meghatározták, ill. algoritmust adtak meg a kiszámolásukra.

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

Mielőtt tovább halad, olvassa el a függelék A.1.4 részét! Ott azt ismertetjük, hogy hogyan lehetett kísérleti tényekből arra következtetni, hogy az elektronnak nem zérus a spinje. A kísérletek eredményeiből az derült ki, hogy az elektron spinje tetszőleges irányú tengelyre vett vetületének két lehetséges értéke van. Ennek alapján azt kell mondanunk, hogy az

³⁹Rudolf Friedrich Alfred Clebsch (1833-1872, német) matematikus, az invariánselmélet, a projektív geometria és az algebrai geometria terén fejtett ki jelentős tevékenységet.

⁴⁰Paul Gordan (1837-1912, német) matematikus, különösen az algebrai geometriában végzett munkássága fontos, továbbfejlesztette az invariánsok elméletét.

elektron spinállapotainak a tere 2-dimenziós. Az s spinű részecske spinállapotainak tere másrésről $(2s + 1)$ -dimenziós. Így **az elektron spinállapotainak tere**

$$2s + 1 = 2 \quad (3.6.1)$$

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

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

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

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

$$\hat{s}^2|\frac{1}{2} m_s\rangle = \frac{3\hbar^2}{4}|\frac{1}{2} m_s\rangle, \quad \hat{s}_z|\frac{1}{2} m_s\rangle = \hbar m_s|\frac{1}{2} m_s\rangle, \quad (3.6.3)$$

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

Szimbolikusan jelölhetjük a bázisvektorokat az

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

számoszlopokkal. Ekkor az állapottér az összes

$$c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (3.6.5)$$

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

$$\hat{s}_j = \frac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}_j \quad (3.6.6)$$

alakban, ahol $\hat{\sigma}_j$ ($j = 1, 2, 3$) az úgynevezett **Pauli⁴¹-mátrixok**:

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

A Pauli-mátrixok önadjungált mátrixok. Bármelyikük négyzete egységmátrix,

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

⁴¹Wolfgang Paulinak (1900-1958, osztrák) ítelték oda az 1945. évi fizikai Nobel-díjat a kizárási elv felfedezéséért, amelyet Pauli-elvnek is hívnak.

Könnyű közvetlen számolással ellenőrizni, hogy

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

4. EGYSZERŰ FIZIKAI RENDSZEREK

4.1. Spin külső mágneses térben

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

$$g_s = \frac{|e|\hbar}{m_e c}, \quad (4.1.1)$$

ahol $-|e|\hbar$ és m_e rendre az elektron töltése és nyugalmi tömege, c pedig a fény sebessége vákuumban⁴². A modell, amit vizsgálunk, egy térbeli pontban rögzített $s = \frac{1}{2}$ spin, ill. a hozzá tartozó mágneses dipólmomentum.

4.1.1. Szabad spin

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

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

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

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

ahol a spin négyzete önadjungált operátor (akárcsak az egyes Descartes-komponensek operátorai). A spin négyzetének operátora az egység-operátor számszorosa,

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

⁴²A giromágneses együttható kifejezésének nevezőjében a c fénysebesség Gauss-egységrendszer használata esetén szerepel, az SI egységrendszerben $g_s = |e|\hbar/m_e$. Bár következtetlennek tűnhet, hogy mindenhol a jegyzetben SI egységrendszert használunk és itt meg más egységrendszerben adom meg a giromágneses együttható képletét, mégis ezt választottam, hogy emlékeztessenek a giromágneses együttható, ill. a mágnesség relativisztikus eredetére. SI-ben végzett tényleges számolás során természetesen a képletben c helyére dimenziótlan 1 tényezőt kell írni.

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

$$\hat{H} = a\hat{s}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 a\hat{1}, \quad (4.1.5)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

A kezdeti spinállapotban a spin tetszőleges irányba mutathat, azaz

$$|\chi_0\rangle = c_{+0}|+\rangle + c_{-0}|-\rangle \quad (4.1.11)$$

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

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

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

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

Ekkor a bázisállapotoknak rendre az alábbi számoszlopok felelnek meg:

$$|+\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4.1.14)$$

és a tetszőleges kezdeti állapot

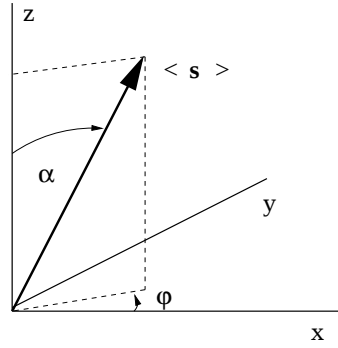
$$|\chi_0\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} c_{+0} \\ c_{-0} \end{pmatrix} = c_{+0} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_{-0} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.1.15)$$

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

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

Ha a normálási feltétel által megengedett legáltalánosabb

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



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

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

$$\langle \chi_0 | \hat{s}_z | \chi_0 \rangle = \frac{1}{2} \hbar \left(\cos^2 \frac{\alpha}{2} - \sin^2 \frac{\alpha}{2} \right) = \frac{1}{2} \hbar \cos \alpha, \quad (4.1.18)$$

$$\langle \chi_0 | \hat{s}_x | \chi_0 \rangle = \frac{1}{2} \hbar \cos \frac{\alpha}{2} \sin \frac{\alpha}{2} (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) = \frac{1}{2} \hbar \sin \alpha \cos \varphi, \quad (4.1.19)$$

$$\langle \chi_0 | \hat{s}_y | \chi_0 \rangle = \frac{1}{2} \hbar i \cos \frac{\alpha}{2} \sin \frac{\alpha}{2} (-e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) = \frac{1}{2} \hbar \sin \alpha \sin \varphi, \quad (4.1.20)$$

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

$$\begin{aligned} \hat{s}_x |+\rangle &= \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hbar |-\rangle, \\ \hat{s}_x |-\rangle &= \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hbar |+\rangle, \\ \hat{s}_y |+\rangle &= \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hbar i \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hbar i |-\rangle, \\ \hat{s}_y |-\rangle &= \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \hbar i \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \hbar i |+\rangle. \end{aligned} \quad (4.1.21)$$

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

Vegyük még észre, hogy a spin-vektor várható értékének négyzete,

$$\sum_{i=1,2,3} \langle \chi_0 | \hat{s}_i | \chi_0 \rangle^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2 [\cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha (\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi)] = \frac{\hbar^2}{4}, \quad (4.1.22)$$

ami nem azonos a spin négyzetének várható értékével,

$$\langle \chi_0 | \hat{s}^2 | \chi_0 \rangle = \frac{3\hbar^2}{4}. \quad (4.1.23)$$

Ebből következik, hogy a szórásnégyzet,

$$\langle \chi_0 | \hat{s}^2 | \chi_0 \rangle - \sum_{i=1,2,3} \langle \chi_0 | \hat{s}_i | \chi_0 \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{2} \quad (4.1.24)$$

nem zérus.

Érdekességként jegyezzük meg, hogy jelenleg kifejlődőben van az informatika új ága, a **kvantuminformatika**. A kvantuminformatikában az elemi információt **kvantumbitek, röviden kubitek** tárolják. A kubit egy lehetséges fizikai megvalósítása az elektron spinje. A klasszikus bitnek 2 lehetséges értéke van, a 0 és az 1, ezért a klasszikus bitet olyan klasszikus fizikai rendszerrel lehet megvalósítani, amelynek 2 állapota van (az állapotterben az állapotok száma 2). Ezzel ellentétben a kubitnek 2 bázisállapota van, amelyeket rendre megfeleltethetünk a kubit 0 és 1 értékének, de ugyanakkor a kubit 2-dimenziós állapottere végtelen sok állapotot tartalmaz, amelyek a 2 bázisállapotnak tetszőleges, 1-re normált lineáris kombinációi. A kubit állapotterének ez a „gazdagsága” informatikai szempontból lehetővé teszi, hogy „egyszerre” legyen beírva a kubitbe a 0 és az 1 érték. A kvantuminformatikában ezért megnyílik a lehetőség, hogy egyidejűleg különböző kezdeti adatokon végezzük el ugyanazt a számolási műveletsort. A **kvantumszámítógépek** ezt, a kvantummechanikai lineáris szuperpozíció elvének következményeként megjelenő „**kvantumpárhuzamosságot**” előnyösen ki tudják használni.

4.1.2. Spin homogén külső mágneses térben

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

$$\hat{H} = a \hat{\vec{s}}^2 - (-g_s) \hat{\vec{s}} \cdot \vec{B} \quad (4.1.25)$$

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

$$\hat{H} = a \hat{\vec{s}}^2 + g_s \hat{s}_z B_z \quad (4.1.26)$$

adódik.

A stacionárius állapotokra vonatkozó Schrödinger-egyenlet:

$$\begin{aligned} \left[a\hat{s}^2 + g_s\hat{s}_zB_z \right] |\chi\rangle &= E|\chi\rangle, \\ \left[\frac{3a}{4}\hbar^2\hat{1} + \frac{1}{2}g_sB_z\hbar\hat{\sigma}_z \right] |\chi\rangle &= E|\chi\rangle. \end{aligned} \quad (4.1.27)$$

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

$$(H) = \begin{pmatrix} \langle +|\hat{H}|+ \rangle & \langle +|\hat{H}|- \rangle \\ \langle -|\hat{H}|+ \rangle & \langle -|\hat{H}|- \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3a}{4}\hbar^2 + \frac{1}{2}g_sB_z\hbar & 0 \\ 0 & \frac{3a}{4}\hbar^2 - \frac{1}{2}g_sB_z\hbar \end{pmatrix}, \quad (4.1.28)$$

majd azt diagonalizáljuk⁴³. 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 eleve diagonálisnak adódik ezen operátorok közös sajátfüggvény-rendszerében, mint bázisban. Ezért a homogén lineáris egyenletrendszer mátrixa determinánsának eltű-

⁴³A stacionárius Schrödinger-egyenlet,

$$(\hat{H} - E)|\varphi\rangle = 0, \quad (4.1.29)$$

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

$$\langle i|(\hat{H} - E)|j\rangle\langle j|\varphi\rangle = 0 \quad (4.1.30)$$

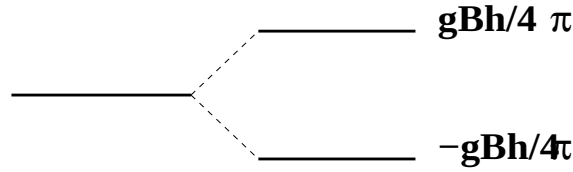
mátrix-egyenlet alakját ölti a $c_j = \langle j|\varphi\rangle$ hullámfüggvényre vonatkozóan. Ez homogén lineáris egyenletrendszer (pontosan annyi darab egyenletet tartalmaz, ahány dimenziós a Hilbert-tér). A homogén lineáris egyenletrendszernek akkor és csak akkor létezik nem triviális megoldása, ha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

$$\det \langle i|(\hat{H} - E)|j\rangle = \prod_n (E_n - E)^{d_n} = 0 \quad (4.1.31)$$

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

$$\langle n', \alpha_{n'}|\hat{H}|n, \alpha_n\rangle = E_n\delta_{n,n'}\delta_{\alpha_n, \alpha_{n'}}. \quad (4.1.32)$$

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



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

nése a

$$\begin{aligned} 0 &= \det \begin{pmatrix} \frac{3a}{4}\hbar^2 + \frac{1}{2}g_s B_z \hbar - E & 0 \\ 0 & \frac{3a}{4}\hbar^2 - \frac{1}{2}g_s B_z \hbar - E \end{pmatrix} \\ &= \left(\frac{3a}{4}\hbar^2 + \frac{1}{2}g_s B_z \hbar - E \right) \left(\frac{3a}{4}\hbar^2 - \frac{1}{2}g_s B_z \hbar - E \right) \end{aligned} \quad (4.1.33)$$

másodfokú⁴⁴ egyenletre vezet. Az energia-sajátértékek:

$$E_{\pm} = \frac{3a}{4}\hbar^2 \pm \frac{1}{2}g_s B_z \hbar. \quad (4.1.34)$$

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

$$\Delta E = g_s B_z \hbar. \quad (4.1.35)$$

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

Az impulzusmomentum négyzetének adott sajátértékéhez tartozó elfajult energiaszint külső mágneses tér hatására bekövetkező felhasadását **Zeeman-effektusnak**⁴⁵ nevezik és különösen fontos szerepet játszik az atomok szerkezetének vizsgálata során.

Példánkban az elektron forgásszimmetrikus rendszer, amíg be nem kapcsoljuk a külső mágneses teret. A forgásszimmetria következménye, hogy az elektron energiaszintje kétszeresen degenerált. A „fel-” ill. „lefelé” álló spinnel jellemzett elektronállapotok **multiplettet**, ún. dublettet alkotnak. Amikor bekapcsoljuk a külső mágneses teret, akkor megsértjük explicit módon az elektron forgásszimmetriáját, a

⁴⁴Az állapotok tere 2-dimenziós, ezért 2×2 -es mátrix determinánsának eltűnését kell megkövetelni.

⁴⁵Hendrik Anton Lorentz (1853-1928, holland) és Pieter Zeeman (1865-1943, holland) 1902-ben fizikai Nobel-díjat kaptak eredményeikért, amelyeket annak kutatásában értek el, hogy a mágnesség milyen hatást gyakorol a sugárzási jelenségekre.

külső homogén mágneses tér jelenlétében már csak a z -tengely körüli elforgatásokkal szembeni szimmetria marad meg. **A szimmetria ilyen, explicit megsértésének a következménye, hogy az elfajult energiaszint felhasadt, hogy a multiplett, esetünkben a dublett „láthatóvá vált”, mint két különböző energiájú állapot.** A szimmetria explicit megsértésének további fontos következménye, hogy most már csak a külső mágneses tér irányában „fel-” ill. „lefelé” mutató spinű két állapot marad energia-sajátállapot. Egy tetszőleges spinállapot általában nem energia-sajátállapot. Amíg a forgásszimmetria sértetlenül fennállt, addig a szabad spin esetén minden spinállapot energia-sajátállapot is volt.

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

4.1.3. A Larmor-precesszió*

A kapott eredmények ismeretében könnyen beláthatjuk, hogy a homogén külső mágneses térbe helyezett spin precesszál a $\vec{B}$ mágneses indukcióvektor iránya körül. Vegyünk egy tetszőleges kezdeti spinállapotot a $t = 0$ időpillanatban, amelyet a (4.1.11) egyenlőség ír le, ahol a kifejtési együtthatókat a (4.1.17) módon parametrizáljuk. Hassunk erre az $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ időfejllesztő operátorral. Ennek hatása csupán annyi lesz, hogy az $\hat{s}_z$ operátor sajátállapotait, amelyek egyúttal energia-sajátállapotok is, meg kell szorozni a megfelelő $e^{-\frac{i}{\hbar}E_{\pm}t}$ fázisfaktorokkal. Az eredmény tehát az alábbi időfüggő spinállapot lesz,

$$\begin{aligned} |\chi(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} + e^{\frac{i}{\hbar}E_-t+i\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \sin \frac{\alpha}{2} \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} + e^{\frac{i}{\hbar}(E_+-E_-)t+i\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \sin \frac{\alpha}{2} \right] \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} + e^{i\varphi(t)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \sin \frac{\alpha}{2} \right], \end{aligned} \quad (4.1.36)$$

ahol a kezdeti φ szög helyett az időtől lineárisan függő

$$\varphi(t) = \varphi + \frac{E_+ - E_-}{\hbar}t = \varphi + \omega_L t \quad (4.1.37)$$

szög és benne az

$$\omega_L = g_s B_z \quad (4.1.38)$$

szögsebesség szerepel. Sámoljuk ki most a spin Descartes-komponenseinek a $|\chi(t)\rangle$ állapotban vett várható értékeit. Ekkor a (4.1.18), (4.1.19) és (4.1.20) egyenletekben csak annyi változik, hogy a kezdeti φ helyére az időtől függő $\varphi(t)$ kerül. Ez

nyilvánvalóvá teszi, hogy a spinvektor várható értéke a mágneses indukció iránya (esetünkben a z -tengely) körül ω_L szögsebességgel forog, miközben nem változik a mágneses indukció irányával bezárt α szöge. Ez a jelenség a **Larmor-precesszió**⁴⁶. Véges T idő alatt a spinvektor várható értékének a mágneses indukcióra vett merőleges vetülete $\Delta\varphi = \omega_L T$ szöggel fordul el.

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:

$$\frac{d\vec{l}}{dt} = \vec{M}, \Rightarrow \frac{d\vec{l}}{dt} = -g\vec{l} \times \vec{B} \equiv -\vec{\omega} \times \vec{l}, \quad (4.1.39)$$

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

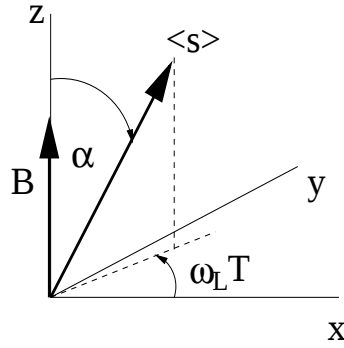
$$\frac{d\vec{l}^2}{dt} = 2\vec{l} \cdot \frac{d\vec{l}}{dt} = -2\vec{l} \cdot (\vec{\omega} \times \vec{l}) = 0, \quad (4.1.40)$$

azaz a mozgás során az impulzusmomentum négyzete állandó. A forgatónyomaték hatására a pörgettyű úgy kényszerül mozogni, hogy ne sértse az impulzusmomentum z -irányú komponensének a megmaradását, miközben a nagysága sem változik. Ennek következtében az impulzusmomentum vektora forog a z -tengely körül, $\vec{\omega} = g\vec{B}$ szögsebességgel precesszál (ld. a 4. ábrát).

A homogén, sztatikus külső mágneses térbe helyezett elektron spin-vektorának várható értéke a kvantummechanikában hasonlóan viselkedik mint egy súlyos pörgettyű impulzusmomentum-vektora: állandó szögsebességgel precesszál a mágneses indukció vektorának iránya körül. A precesszió szögsebessége a kvantummechanikában is $g_s|\vec{B}|$ nagyságú. Az elektron mágneses momentuma és spinje közötti arányossági tényező a tapasztalat szerint (Einstein és de Haas kísérletének eredményei alapján, ld. a A.1.4 függelék) $g_s = \frac{|e|\hbar}{m_e c}$, ahol m_e az elektron nyugalmi tömege, c pedig a fény sebessége a vákuumban. Ez az érték 2-szerese a $g = \frac{|e|\hbar}{2m_e c}$ arányossági tényezőnek, ami az elektron pályaimpulzusmomentumából származó mágneses momentumban szerepel. Az elektron pályamozgásához tartozó g giromágneses tényezőnek egyszerű klasszikus fizikai magyarázata van annak alapján, hogy pl. R sugarú

⁴⁶Sir Joseph Larmor (1857-1942, ír) fizikus. A legkisebb hatás elvének egyik hirdetője. Még mielőtt J.J. Thomson 1897-ben felfedezte az elektront, Larmor felismerte, hogy az elektromos töltés egyetlen forrása egy részecske, és hogy az elektromos áram egyedüli oka sok ilyen részecske áramlása.

Joseph John Thomson (1856-1940, angol) 1906-ban fizikai Nobel-díjat kapott a gázok elektromos vezetésére vonatkozó elméleti és kísérleti vizsgálatában szerzett nagy érdemeiért.



4. ábra. Az $s = \frac{1}{2}$ spin Larmor-precessziója sztatikus, homogén B indukciójú mágneses térben.

körpályán, $v = \text{áll.}$ kerületi sebességgel mozgó elektron pályaimpulzusmomentuma $\ell_z = Rm_e v$, az általa képviselt áram $i = -|e|\frac{v}{2\pi R}$, és a köráram mágneses dipólmomentuma $\mu_z = \frac{1}{c}iR^2\pi$, úgyhogy

$$\mu_z = -\frac{|e|v}{2\pi Rc}R^2\pi = -\frac{|e|}{2\pi R^2m_e c}R^2\pi\ell_z = -\frac{|e|}{2m_e c}\ell_z. \quad (4.1.41)$$

Nagyjából hasonló nagyarázatot kapunk a kvantummechanika keretében is. Ezt majd akkor beszéljük meg, amikor a hidrogén-atom gerjesztett állapotainak tulajdonságait tárgyaljuk. Ugyanakkor az elektron spinjéhez tartozó giromágneses tényezőt csak a kvantumtérelmélet eszközeivel, a kvantumelektrodinamika keretében tudjuk megmagyarázni, mert az relativisztikus effektussal kapcsolatos.

4.2. Pontrészcseke mozgása

Ebben a fejezetben a pontrészcseke térbeli mozgásának speciális eseteivel fogunk foglalkozni. Az első feladat az, hogy keressük meg a pontrészcseke Hamilton-operátorának az alakját. Miután tanulmányozzuk a szabad részecske mozgását, tárgyalni fogjuk a részecske mozgását külső potenciál jelenlétében. Végezetül a hidrogén-atommal foglalkozunk, mint az atommag (az adott esetben a proton) Coulomb-terében mozgó elektron esetével. Vonatkoztatási rendszernek inerciarendszert választunk, azaz olyan rendszert, amelyből nézve a tér homogén és izotróp, az idő pedig homogén. Ehrenfest első tételéből tudjuk, hogy inerciarendszerben a részecske helyzetvektora operátorának várható értéke az idő lineáris függvénye, azaz a részecske helyzetvektorának várható értéke olyan vektor, amelynek „hegye” egyenesvonalú egyenletes mozgást végez.

4.2.1. Belső szabadsági fokok nélküli részecske Hamilton-operátora

Tegyük fel, hogy a részecske a térbeli helyzetén és impulzusán kívül semmilyen más, ún. belső szabadsági fokkal, mint pl. a zérustól különböző spin, nem rendelkezik. Ekkor a klasszikus mechanikai Hamilton-függvény alakja és a megfeleltetési elv van segítségünkre abban, hogy megtaláljuk a részecske Hamilton-operátorát. Általánosan feltehetjük, hogy a részecske Hamilton-operátora a kinetikus energia $\hat{T}$ és a potenciális energia $\hat{V}$ operátorának az összege:

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

Ha elvégezzük a Heisenberg-féle kanonikus kvantálást, azaz előírjuk a Heisenberg-féle csererelációkat, és a klasszikus helyzetvektort és impulzust a megfelelő operátorokra cseréljük, akkor a következő alakban kapjuk meg rendre a kinetikus energia és a potenciális energia operátorát:

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

A belső szabadsági fokok nélküli részecske Hamilton-operátora tehát:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}). \quad (4.2.3)$$

Koordináta-reprezentációban ez az operátor

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \quad (4.2.4)$$

alakot ölt. Ennek megfelelően a pont részecske koordináta-hullámfüggvényére vonatkozó Schrödinger-egyenlet

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}, t) \quad (4.2.5)$$

alakú. A Schrödinger-egyenlet az időváltozó tekintetében első- a koordináták tekintetében másodrendű, lineáris, parciális differenciálegyenlet. Következésképpen egyértelműen létezik a megoldása, ha

1. adottak a hullámfüggvényre vonatkozó térbeli határfeltételek, pl. a hullámfüggvény értéke a térbeli értelmezési tartománya határain; és
2. adott a határfeltételeket kielégítő kezdőfeltétel, azaz a hullámfüggvény a $t = t_0$ kezdeti időpillanatban.

A megoldás ekkor az időváltozóban legalább egyszer, a koordinátákban legalább kétszer differenciálható hullámfüggvény. Ennek következménye, hogy a megoldás folytonos és egyszer folytonosan differenciálható a térváltozók tekintetében.

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

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

4.2.2. Nem zérus spinű részecske Hamilton-operátora*

Várakozásunk az, hogy mindaddig, amíg a részecske spinje nem vesz részt a kölcsönhatásokban, addig a Hamilton-operátor alakja lényegében ugyanaz marad, mint a zérus spinű részecske esetén.

A nem zérus spinű részecske állapottere a térbeli állapotok $\mathcal{H}_r$ terének és a spin-állapotok $\mathcal{H}_s$ terének tenzori szorzata. A részecske állapotterét olyan szeparálható állapotok feszítik ki, amelyek a térbeli állapot és a spinállapot tenzori szorzatai. Következésképpen, a részecske hullámfüggvénye a koordinátahullámfüggvény és a spinhullámfüggvény szorzata, ill. ilyen szorzatok lineáris kombinációja. A hullámfüggvény tehát általában az $\vec{r}$ helyzetvektornak és a részecske σ spinváltozójának a négyzetesen integrálható függvénye.

Vegyük pl. az $\frac{1}{2}$ -spinű elektront. Korábban láttuk, hogy bevezethető 2 bázisállapot a spinállapotok terében, amelyek az $\hat{s}_z$ spinvetület $\pm\frac{1}{2}\hbar$ sajátértékeihez tartoznak, ezek hullámfüggvényei 2-komponensűek, $\chi_\sigma^{[\pm]} = \delta_{\sigma,\pm\frac{1}{2}}$, úgyhogy

$$\frac{1}{2}\hat{s}_z\chi_\sigma^{[\pm]} = \pm\frac{1}{2}\hbar\chi_\sigma^{[\pm]}. \quad (4.2.7)$$

Mivel az elektron hullámfüggvénye a σ diszkrét változónak is függvénye, ezért azt is mondhatjuk, hogy az elektron hullámfüggvényének 2 komponense van, amelyeket 2-elemű számoszlopban rendezhetünk el:

$$\Psi \equiv \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} = \Psi_+(\vec{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \Psi_-(\vec{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.2.8)$$

Az állapot normálási feltétele:

$$1 = \int d\vec{r} \sum_{\sigma=\pm\frac{1}{2}} |\Psi(\vec{r},\sigma)|^2 = \int d\vec{r} \left(|\Psi_+(\vec{r})|^2 + |\Psi_-(\vec{r})|^2 \right). \quad (4.2.9)$$

Speciális esetek:

1. Ha az elektron spinje és térbeli mozgása között semmilyen kölcsönhatás nincsen és az elektron spinje semmilyen külső térrel sem hat kölcsön, akkor az elektron Hamilton-operátora,

$$\hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \right] \otimes \hat{1}_s \quad (4.2.10)$$

a spinállapotok terén $\hat{1}_s$ egység-operátorként hat. Ilyenkor az elektron stacionárius állapotai-
ban a hely- és a spinfüggés szeparálható. Az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldása pedig
megőrzi a kezdeti feltétel szeparált alakját:

$$\Psi_s(\vec{r}; t) = \psi(\vec{r}; t)\chi_\sigma(t). \quad (4.2.11)$$

Ekkor a Schrödinger-egyenlet megoldása során el is felejtkezhetünk a spinről, hiszen a
spinállapot a mozgás során nem fog megváltozni, $\partial_t \chi_\sigma(t) = 0$ miatt $\chi_\sigma(t) = \chi_\sigma(t_0)$, a
térbeli hullámfüggvény pedig ugyanúgy változik az időben, mintha a részecskének nem is
lenne spinje:

$$i\hbar \partial_t \psi(\vec{r}; t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}; t). \quad (4.2.12)$$

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

$$\hat{H} = \hat{1}_{\vec{r}} \otimes \hat{H}_s \quad (4.2.13)$$

a koordináta-hullámfüggvények $\mathcal{H}_r$ terén hat $\hat{1}_r$ egységoperátorként. Itt $\hat{H}_s = \hat{a}\hat{s}^2 + g_s\hat{s} \cdot \vec{B}$
az előző fejezetben diszkutált Hamilton-operátor, ahol g_s a spin és a mágneses momen-
tum közötti arányossági tényező. Rendszerint az $a = 0$ választással szoktunk élni, azaz a
szabad elektronnak a spinjéből származó saját energiáját nem szoktuk hozzáadni az elekt-
ron energiájához. Ez azért is indokolt, mert a kvantummechanika keretei között ennek a
sajátenergiának a meghatározására nincsen lehetőségünk.

3. *Az elektron pályaimpulzusmomentumához és spinjéhez is tartozik mágneses dipólmomentum,
ha ezek külső mágneses térrel hatnak kölcsön, akkor az elektron Hamilton-operátora*

$$\hat{H} = \hat{H}_0 \otimes \hat{1}_s + g_l \vec{B} \cdot (\hat{\ell} \otimes \hat{1}_s + 2\hat{1}_{\vec{r}} \otimes \hat{s}) \quad (4.2.14)$$

ahol $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V(r)$ az elektron Hamilton-operátora $V(r)$ centrális potenciálban és a
kölcsönhatást a külső mágneses térrel a Hamilton-operátor második tagja írja le. Utóbbiban
felhasználtuk, hogy a spin giromágneses együtthatója a pályaimpulzusmomentumhoz tartozó
giromágneses együttható kétszerese, $g_s = 2g_l$. Az elektron pályaimpulzusmomentumától és
spinjétől származó mágneses dipólmomentumoknak a homogén külső mágneses térrel történő
kölcsönhatása okozza a Zeeman-effektust, az atomi energiaszintek m_ℓ és m_s szerinti felha-
sadását. Valóban a fenti $\hat{H}$ Hamilton-operátor felcserélhető az $\hat{\ell}^2$, $\hat{s}^2$, $\hat{\ell}_z$ és $\hat{s}_z$ operátorokkal,
ahol a z -tengely a homogén külső mágneses tér irányába mutat. Így az atomi energiaszintek
a külső mágneses térben az E energia mellett az ℓ , m_ℓ és m_s kvantumszámokkal jellemez-
hetők. A kölcsönhatási energia $\Delta E = g_l B(m_\ell + 2m_s)$, ami azt jelenti, hogy adott E -vel
és ℓ -lel jellemzett állapot energiája a mágneses tér hatására felhasad m_ℓ és m_s értékétől
függően.

4. *Az elektron spinje és térbeli mozgása közötti kölcsönhatás egyik példája a tapasztalat szerint
az úgynevezett **spin-pálya kölcsönhatás**, amelynek Hamilton-operátora*

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

amelyet röviden csak

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

alakban szoktunk írni, ahol $f(\vec{r})$ csak a helyzetvektortól függő függvény. A tapasztalat
szerint ilyen kölcsönhatás fellép az atomi elektron pályamomentuma és spinje között.

A klasszikus fizikai kép azt sugallja, hogy mind az elektron pályamozgásához, mindpedig a spinjéhez tartozik mágneses momentum, és azok, mint mágneses dipólusok kölcsönhatnak egymással. A spin-pálya kölcsönhatás kvantumfizikai magyarázatát csak a speciális relativitási elvet és a kvantumfizikát ötvöző kvantumtérelmélet, pontosabban a kvantumelektrodinamika keretében találták meg.

Az $\hat{\ell} \cdot \hat{s}$ operátor a $\hat{j} = \hat{\ell} + \hat{s}$ teljes impulzusmomentum segítségével

$$\hat{\ell} \cdot \hat{s} = \frac{1}{2}[\hat{j}^2 - \hat{\ell}^2 - \hat{s}^2] \quad (4.2.17)$$

alakba írható. Innen látjuk, hogy $\hat{H}_{s.p.}$ felcserélhető a $\hat{j}^2$, $\hat{\ell}^2$ és $\hat{s}^2$ operátorokkal. Ugyanakkor $\hat{j}_z$ is felcserélhető az utóbbi operátorokkal és a spin-pálya kölcsönhatás Hamilton-operátorával. Másrészt viszont $\hat{\ell}_z$ és $\hat{s}_z$ nem felcserélhetők a $\hat{j}^2$ operátorral, s így $\hat{H}_{s.p.}$ -val sem. Centráliszimmetrikus potenciálban mozgó elektront feltételezve, $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{s.p.}$, ahol $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta + V(r)$, a spin-pálya kölcsönhatás azt eredményezi, hogy az energiaszinteket az $E, j, \ell, s = \frac{1}{2}$ kvantumszámokkal lehet jellemezni, minden energiaszint $(2j+1)$ -szeresen elfajult m_j lehetséges értékeinek megfelelően. A spin-pálya kölcsönhatás miatti energiafelhasadás

$$\Delta E = -\frac{1}{2}\hbar^2 f(r) \left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} \right] \quad (4.2.18)$$

A spin-pálya kölcsönhatás következtében az atomi spektrumokban, a „spektrum-vonalak” multiplettekre történő felhasadását, a spektrum-vonalak úgynevezett finom szerkezetét lehet megfigyelni.

Ehhez hasonló az úgynevezett **hiperfinom felhasadás**, ami azért lép fel, mert az atomi elektron pályaimpulzusmomentuma és az atommag spinje is kölcsönhat egymással. Mivel az elektron-spin giromágneses együtthatója, g_s és az atommag (hidrogén-atom esetében a proton) spinjének giromágneses tényezője, g_p között

$$g_p \sim g_s \mathcal{O}\left(\frac{m_e}{m_p}\right) \quad (4.2.19)$$

nagyságrendi reláció áll fenn, ahol m_e , ill. m_p rendre az elektron, ill. a proton nyugalmi tömege, és hányadosuk $\frac{m_e}{m_p} \sim \frac{1}{2000}$, azért a hiperfinom szerkezetben az energianívók távolsága kb. 3 nagyságrenddel kisebb, mint a finomszerkezetben.

4.2.3. Szabad részecske mozgása inerciarendszerben

A zérus spinű szabad részecske Hamilton-operátora inerciarendszerben

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}. \quad (4.2.20)$$

Ezért koordináta-reprezentációban a szabad részecske Schrödinger-egyenlete:

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}, t). \quad (4.2.21)$$

Az időfüggő Schrödinger-egyenletnek a megoldása akkor egyértelmű, ha megadjuk, hogy milyen határfeltételeket és milyen kezdeti feltételt kielégítő megoldást keresünk.

A fizikai feladat megoldását olyan hullámfüggvények között kell keressük, amelyek a térbeli végtelenben, azaz az $|\vec{r}| \rightarrow \infty$ határesetben elég gyorsan eltűnnek ahhoz, hogy a hullámfüggvény négyzetesen integrálható legyen, azaz az

$$\int dV |\psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (4.2.22)$$

integrál véges legyen. Tegyük fel, hogy kezdőfeltételként adott egy ilyen határfeltételeket kielégítő és 1-re normált hullámfüggvény a $t = t_0$ pillanatban: $\psi(\vec{r}, t_0) = f(\vec{r})$, amelyre tehát $\int dV |f(\vec{r})|^2 = 1$. Keressük meg a hullámegyenlet ezen kezdeti feltételhez tartozó megoldását!

A következők szerint járunk el:

1. Megoldjuk a szabad részecske Hamilton-operátorának sajátérték-egyenletét. Tulajdonképpen ez nem új feladat, mert a szabad részecske Hamilton-operátora az impulzus operátorából van megalkotva, ezért a Hamilton-operátor felcserélhető az impulzusoperátor valamennyi $\hat{p}_i$ ($i = 1, 2, 3$) Descartes-komponensének operátorával:

$$[\hat{p}_i, \hat{H}] = 0 \quad (i = 1, 2, 3). \quad (4.2.23)$$

Következésképpen az impulzus operátorának $\psi_{\vec{p}}(\vec{r})$ sajátfüggvényei,

$$\hat{\vec{p}}\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \vec{p}\psi_{\vec{p}}(\vec{r}), \quad (4.2.24)$$

együttal a Hamilton-operátornak is sajátfüggvényei,

$$\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{\vec{p}^2}{2m}\psi_{\vec{p}}(\vec{r}), \quad (4.2.25)$$

ahol a sajátfüggvények,

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \prod_{j=1}^3 \psi_{p_j}(r_j) = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}, \quad (4.2.26)$$

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

$$\int dV \psi_{\vec{p}'}^*(\vec{r})\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = (2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p} - \vec{p}') \quad (4.2.27)$$

általánosított ortonormáltsági relációkkal. A (4.2.26) impulzus-sajátfüggvények kielégítik az időtől független Schrödinger-egyenletet,

$$\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = E\psi_{\vec{p}}(\vec{r}), \quad (4.2.28)$$

az

$$E(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (4.2.29)$$

sajátértékkel. Az energiaspektrum tehát folytonos, $E \geq 0$. A szabad részecske „stacionárius állapotainak” időfüggését is figyelembe véve azt találjuk, hogy ezek az „állapotok” de Broglie-féle anyaghullámok:

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{r} \cdot \vec{p} - E(\vec{p})t)}, \quad (4.2.30)$$

amelyek hullámhossza

$$\lambda = \frac{2\pi}{|\vec{p}|/\hbar} = \frac{h}{|\vec{p}|}, \quad (4.2.31)$$

a de Broglie-féle hullámhossz. Megjegyezzük, hogy impulzus-sajátállapotban az impulzus bizonytalansága zérus, mert az impulzusmérés eredménye bizonyossággal a $\vec{p}$ érték. Fizikai intuíciónk azt sugja, hogy a helykoordináták bizonytalansága végtelen, jóllehet a megfelelő várható érték nem jól definiált, mert az impulzus-sajátfüggvények normája nem véges.

Formálisan a helyzetvektor várható értékét úgy becsülhetjük, hogy először véges V térfogatot feltételezünk, amely a tértükrözéssel szemben invariáns, majd a számolás legvégén vesszük a $V \rightarrow \infty$ határátmenetet:

$$\vec{r} = \frac{\langle \vec{p} | \hat{\vec{r}} | \vec{p} \rangle}{\langle \vec{p} | \vec{p} \rangle} = \frac{\int_V dV e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \vec{r} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}}{\int_V dV |e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}|^2} = \frac{\int_V dV \vec{r}}{\int_V dV} = \frac{0}{V} = 0. \quad (4.2.32)$$

Ekkor a helyzetvektor szórásnégyzete:

$$(\Delta r)^2 = \overline{\vec{r}^2} - \vec{r}^2 = \overline{\vec{r}^2} = \frac{\int_V dV e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \vec{r}^2 e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}}{\int_V dV |e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}|^2} = \frac{\int_V dV \vec{r}^2}{\int_V dV}. \quad (4.2.33)$$

Válasszuk pl. a V térfogatot az origó középpontú, R sugarú gömbnek, akkor

$$(\Delta r)^2 = \frac{4\pi \int_0^R dr r^4}{4\pi \int_0^R dr r^2} = \frac{R^5}{5} \frac{3}{R^3} = \frac{3}{5} R^2, \quad (4.2.34)$$

ami végtelenhez tart, ha $R \rightarrow \infty$, azaz amikor a végtelen térfogat határesetére térünk át.

2. Tetszőleges $\psi(\vec{r}, t)$ hullámfüggvény kifejtethető az impulzus-sajátfüggvények teljes rendszere szerint

$$\psi(\vec{r}, t) = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\psi}(\vec{p}, t) \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\psi}(\vec{p}, t) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \quad (4.2.35)$$

alakban, ahol nyilvánvalóan a $\tilde{\psi}(\vec{p}, t)$ lineárkombinációs együtthatók hordozzák az időfüggést. A $\tilde{\psi}(\vec{p}, t)$ függvény nem más, mint a $\psi(\vec{r}, t)$ függvény Fourier-transzformáltja:

$$\tilde{\psi}(\vec{p}, t) = \int d\vec{r} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{p} | \psi \rangle. \quad (4.2.36)$$

Ez egyúttal a $|\psi\rangle$ állapot hullámfüggvénye az impulzus-reprezentációban. A kezdeti feltételt jelentő $f(\vec{r})$ hullámfüggvény ugyancsak kifejezhető az impulzus sajátfüggvényei szerint,

$$f(\vec{r}) = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{f}(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}, \quad (4.2.37)$$

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

$$\tilde{\psi}(\vec{p}, t_0) = \tilde{f}(\vec{p}) = \int dV \psi_{\vec{p}}^*(\vec{r}) f(\vec{r}) = \int dV e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} f(\vec{r}). \quad (4.2.38)$$

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

$$i\hbar \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \partial_t \tilde{\psi}(\vec{p}, t) \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\psi}(\vec{p}, t) \frac{\vec{p}^2}{2m} \psi_{\vec{p}}(\vec{r}). \quad (4.2.39)$$

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

$$i\hbar \partial_t \tilde{\psi}(\vec{q}, t) = \frac{\vec{q}^2}{2m} \tilde{\psi}(\vec{q}, t). \quad (4.2.40)$$

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

$$\tilde{\psi}(\vec{q}, t) = \tilde{f}(\vec{q}) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\vec{q}^2}{2m} (t-t_0)} \quad (4.2.41)$$

A szabad részecske adott kezdeti feltételhez tartozó mozgását tehát a

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) &= \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{f}(\vec{p}) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\vec{p}^2}{2m} (t-t_0)} \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) \\ &= \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{f}(\vec{p}) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\vec{p}^2}{2m} (t-t_0) + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{r}' \int d\vec{p} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\vec{p}^2}{2m} (t-t_0) + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} f(\vec{r}') \\ &= \left(\frac{m}{i2\pi\hbar(t-t_0)} \right)^{3/2} \int d\vec{r}' f(\vec{r}') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m(\vec{r} - \vec{r}')^2}{2(t-t_0)} \right\} \end{aligned} \quad (4.2.42)$$

hullámfüggvény írja le.

Mielőtt tovább vizsgálódunk, máris tehetünk egy fontos megállapítást. A $\tilde{\psi}(\vec{p}, t)$ hullámfüggvény nem más, mint a szabad részecske hullámfüggvénye az impulzus-reprezentációban. Annak a valószínűsége, hogy a szabad részecske impulzusa a $\vec{p}$ impulzus körüli infinitezimális $d\vec{p}$ impulzustérfogatba esik

$$dw(\vec{p}) = |\tilde{\psi}(\vec{p}, t)|^2 \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} = |\tilde{f}(\vec{p})|^2 \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (4.2.43)$$

Látjuk tehát, hogy ez a valószínűség nem változik a szabad részecske mozgása során. A részecske impulzusának várható értéke,

$$\vec{p} = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} |\tilde{\psi}(\vec{p}, t)|^2 \vec{p} = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} |\tilde{f}(\vec{p})|^2 \vec{p} \quad (4.2.44)$$

és szórásnégyzete,

$$\begin{aligned} (\Delta p)^2 &= \overline{\vec{p}^2} - \vec{p}^2 = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} |\tilde{\psi}(\vec{p}, t)|^2 \vec{p}^2 - \vec{p}^2 \\ &= \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} |\tilde{f}(\vec{p})|^2 \vec{p}^2 - \vec{p}^2 \end{aligned} \quad (4.2.45)$$

egyaránt állandó a mozgás során.

4.2.4. A hullámcsomag szétfolyása

A részecskeforrások, részecskegyorsítók általában olyan állapotban állítanak elő részecskéket, amelyben a részecske helye és impulzusa elég jól meghatározott. Más-képpen fogalmazva az állapot a koordinátatérben és az impulzustérben is kellően lokalizált. Természetesen a határozatlansági elv szab korlátot annak, hogy mennyire lehet egyidejűleg kicsinnyé tenni a térbeli és az impulzustérbeli határozatlanságot. Egy lehetséges, térben lokalizált kezdeti állapot koordináta-hullámfüggvénye:

$$f(\vec{r}) = \mathcal{N} \exp\left(-\frac{\vec{r}^2}{4s^2} + \frac{i}{\hbar} \vec{p}_0 \cdot \vec{r}\right), \quad (4.2.46)$$

ahol $s > 0$ távolság dimenziójú valós paraméter, $\mathcal{N}$ normálási tényező, és feltesszük, hogy a $\vec{p}_0$ impulzus eleget tesz a $p_0 \equiv |\vec{p}_0| \gg \hbar/s$ feltételnek. Az utóbbi azt jelenti, hogy s sokkal nagyobb, mint a $\vec{p}_0$ impulzushoz tartozó $\lambda_0 = \hbar/p_0$ redukált de Broglie-féle hullámhossz,

$$s \gg \frac{\hbar}{p_0} = \lambda_0. \quad (4.2.47)$$

Az $f(\vec{r})$ kezdeti állapotnak az impulzus-hullámfüggvénye:

$$\begin{aligned} \tilde{f}(\vec{p}) &= \int d\vec{r} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} f(\vec{r}) = \mathcal{N} \int d\vec{r} \exp\left(-\frac{\vec{r}^2}{4s^2} - \frac{i}{\hbar} (\vec{p} - \vec{p}_0) \cdot \vec{r}\right) \\ &= (4\pi s^2)^{3/2} \mathcal{N} \exp\left(-\frac{(\vec{p} - \vec{p}_0)^2}{(\hbar/s)^2}\right). \end{aligned} \quad (4.2.48)$$

Ezután közvetlen számolással meggyőződhetünk róla, hogy a kezdeti $t = t_0$ időpillanatban

$$\vec{r}(t_0) = \int d\vec{r} |f(\vec{r})|^2 \vec{r} = \vec{0}, \quad (4.2.49)$$

$$\vec{p}(t_0) = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} |\tilde{f}(\vec{p})|^2 \vec{p} = \vec{p}_0. \quad (4.2.50)$$

$$(\Delta r)^2(t_0) = \overline{\vec{r}^2} - [\vec{r}(t_0)]^2 = \overline{\vec{r}^2} = \int d\vec{r} |f(\vec{r})|^2 \vec{r}^2 = 3s^2, \quad (4.2.51)$$

$$\begin{aligned} (\Delta p)^2(t_0) &= \overline{\vec{p}^2} - [\vec{p}(t_0)]^2 = \overline{\vec{p}^2} = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} |\tilde{f}(\vec{p})|^2 \vec{p}^2 \\ &= \frac{(4\pi s^2)^3}{(2\pi\hbar)^3} |\mathcal{N}|^2 \int d\vec{q} \vec{q}^2 \exp\left(-\frac{\vec{q}^2}{\hbar^2/(2s^2)}\right) = \frac{\hbar^2}{4s^2}, \end{aligned} \quad (4.2.52)$$

ahol felhasználtuk a normálási feltételt,

$$1 = \int d\vec{r} |f(\vec{r})|^2 = |\mathcal{N}|^2 I_0, \quad I_0 = \int d\vec{r} \exp\left(-\frac{r^2}{2s^2}\right) = \left(\frac{\pi}{1/(2s^2)}\right)^{3/2} \quad (4.2.53)$$

és a

$$\int d\vec{q} \vec{q}^2 \exp\left(-\frac{\vec{q}^2}{\hbar^2/(2s^2)}\right) = -\frac{\partial}{\partial(2s^2/\hbar^2)} I_0 = \frac{3\pi^{3/2}}{2} \left(\frac{2s^2}{\hbar^2}\right)^{-5/2} \quad (4.2.54)$$

integrált. Látjuk tehát, hogy a kezdeti állapot $\vec{p}_0$ impulzussal rendelkező hullámcsomag, ami a koordinátarendszer origójában tartózkodik, térbeli kiterjedését a $(\Delta r)^2(t_0) = 3s^2$ szórásnégyzet, impulzusának határozatlanságát a $(\Delta p)^2 = \hbar^2/4s^2$ szórásnégyzet jellemzi, és a határozatlansági relációt a

$$(\Delta p)(t_0) (\Delta r)(t_0) = \sqrt{\frac{3}{4}} \hbar \quad (4.2.55)$$

alakban elégíti ki. Ha $p_0 \gg (\Delta p)(t_0) = \hbar/(2s)$, akkor az állapot az impulzustérben is jól lokalizált.

Az előző fejezetben beláttuk, hogy a hullámcsomag szabad mozgása során az impulzus várható értéke és a szórásnégyzete nem változik meg. A továbbiakban azt vizsgáljuk meg, hogy hogyan változik a hullámcsomag térbeli kiterjedése a mozgása során. Induljunk ki a hullámcsomag-állapot időfüggésének (4.2.42) képletéből, és helyettesítsük be a (4.2.46) kezdeti feltételt az integrandusba:

$$\psi(\vec{r}, t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar(t-t_0)}\right)^{3/2} \int d\vec{r}' \mathcal{N} \exp\left(-\frac{\vec{r}'^2}{4s^2} + \frac{i}{\hbar} \vec{p}_0 \cdot \vec{r}' + \frac{i}{\hbar} \frac{m(\vec{r}' - \vec{r})^2}{2(t-t_0)}\right). \quad (4.2.56)$$

Rendezzük az integrandusban szereplő exponenciális függvény argumentumát,

$$\text{argum.} = -\left(\frac{1}{4s^2} - \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2(t-t_0)}\right) \vec{r}^2 + \frac{i}{\hbar} \vec{r} \cdot \left(\vec{p}_0 - \frac{m\vec{r}}{t-t_0}\right) + \frac{i}{\hbar} \frac{m\vec{r}^2}{2(t-t_0)}, \quad (4.2.57)$$

és végezzük el a térfogatra a Gauss-integrált:

$$\int d\vec{r}' \exp(\text{argum.}) = \left[\pi \left(\frac{1}{4s^2} - \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2(t-t_0)} \right)^{-1} \right]^{3/2} \exp(X(\vec{r}, t)), \quad (4.2.58)$$

ahol

$$\begin{aligned} X(\vec{r}, t) &= -\frac{1}{4\hbar^2} \left(\vec{p}_0 - \frac{m\vec{r}}{t-t_0} \right)^2 \left(\frac{1}{4s^2} - \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2(t-t_0)} \right)^{-1} \\ &= -\frac{1}{\hbar^2} \frac{m^2}{(t-t_0)^2} \left(\vec{r} - \frac{\vec{p}_0(t-t_0)}{m} \right)^2 \frac{\hbar(t-t_0)}{2m} \frac{1}{\frac{\hbar(t-t_0)}{2ms^2} - i} \\ &= -\frac{m}{2\hbar(t-t_0)} \left(\vec{r} - \frac{\vec{p}_0(t-t_0)}{m} \right)^2 \frac{\frac{\hbar(t-t_0)}{2ms^2} + i}{1 + \frac{\hbar^2(t-t_0)^2}{4m^2s^4}}. \end{aligned} \quad (4.2.59)$$

Az exponenciális függvény $X(\vec{r}, t)$ argumentumában szétválasztottuk a valós és képzetes részeket. A hullámcsomaggal leírt állapotban a részecske $\vec{r}$ helyen történő megtalálásának valószínűségi sűrűsége

$$\begin{aligned} |\psi(\vec{r}, t)|^2 &= A(t-t_0) \exp \left\{ -\frac{m}{\hbar(t-t_0)} \left(\vec{r} - \frac{\vec{p}_0(t-t_0)}{m} \right)^2 \frac{\frac{\hbar(t-t_0)}{2ms^2}}{1 + \frac{\hbar^2(t-t_0)^2}{4m^2s^4}} \right\} \\ &= A(t-t_0) \exp \left\{ -\frac{\left(\vec{r} - \frac{\vec{p}_0(t-t_0)}{m} \right)^2}{2s^2 + \frac{\hbar^2(t-t_0)^2}{2m^2s^2}} \right\} \end{aligned} \quad (4.2.60)$$

alakú függvény, ahol az $A(t-t_0)$ amplitúdó lassan csökken $t-t_0$ növekedtével. Hasonlítsuk össze ezt az eredményt a kezdeti hullámcsomag-állapotot jellemző

$$|f(\vec{r})|^2 = |\mathcal{N}|^2 \exp \left(-\frac{\vec{r}^2}{2s^2} \right) \quad (4.2.61)$$

valószínűségi sűrűséggel. Látjuk, hogy a hullámcsomag mozgása során a valószínűségi sűrűség megőrzi a Gauss-függvény alakját. A valószínűségi sűrűség maximumának helye az

$$\vec{r}(t) = \frac{\vec{p}_0}{m}(t-t_0) \quad (4.2.62)$$

összefüggésnek megfelelően egyenesvonalú egyenletes mozgást végez $\vec{v}_0 = \vec{p}_0/m$ sebességgel. Eközben az állapot térbeli kiterjedése nő, hiszen a kezdeti állapot kiterjedését jellemző s^2 paraméter szerepét a $t > t_0$ pillanatban az az s'^2 paraméter veszi át, amelyre

$$s'^2 = s^2 + \frac{\hbar^2(t - t_0)^2}{4m^2 s^2}. \quad (4.2.63)$$

A t pillanatban az állapotot az

$$\vec{r}(t) = \vec{v}_0(t - t_0), \quad (4.2.64)$$

$$\vec{p}(t) = \vec{p}_0, \quad (4.2.65)$$

$$(\Delta r)^2(t) = 3s'^2 = (\Delta r)^2(t_0) + \frac{3\hbar^2(t - t_0)^2}{4m^2 s^2}, \quad (4.2.66)$$

$$(\Delta p)^2(t) = (\Delta p)^2(t_0) = \frac{\hbar^2}{4s^2} \quad (4.2.67)$$

várható értékek és szórásnégyzetek jellemzik. A mozgás során a hullámcsomag a térben szétfolyik, miközben az $A(t - t_0)$ amplitúdó fokozatosan csökken, hogy a valószínűségi sűrűség teljes térre vett integrálja megmaradjon 1-gyel egyenlőnek. A szétfolyás karakterisztikus ideje

$$\tau_c \approx \frac{ms^2}{\hbar}. \quad (4.2.68)$$

4.2.5. Ehrenfest tétele. Newton törvényei?

Vizsgáljuk meg, hogy a kvantummechanikában érvényben maradnak-e Newton törvényei valamilyen általánosított alakban. **Newton⁴⁷ 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 abszolút értéke négyzetének maximumhelye egyenesvonalú egyenletes mozgást végez. Ez így nem túl működőképes mód arra, hogy eldöntsük, vajon az adott vonatkoztatási rendszer inerciarendszer vagy sem.

⁴⁷Isaac Newton (1642-1727, angol) kidolgozta a mechanika mai napig is helyes elméletét, amelynek sarokkövét a róla elnevezett mozgástörvények és a gravitációs vonzás törvénye képezi. A centripetális erő magyarázata is tőle származik. Kidolgozta a színelméletet. Legfontosabb matematikai eredményei a binomiális tétel és a differenciálszámítás alapjainak kidolgozása.

Egyrészt az inerciarendszer ilyen módon történő megkeresése a szabad részecskére vonatkozó időtől függő Schrödinger-egyenletnek egy speciális kezdőfeltételhez tartozó megoldásához kötődik. Másrészt a hullámcsomag abszolút értéke négyzetének maximumhelyét nem lehet közvetlenül mérni.

A külső potenciálisenergia-mezőben mozgó m tömegű (nem relativisztikus) részecske Hamilton-operátora

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\vec{r}). \quad (4.2.69)$$

A részecske tetszőleges állapotára érvényes állításokat is kaphatunk, ha a helyzetvektor operátora várható értékének és az impulzus operátora várható értékének idő szerinti első deriváltját vizsgáljuk. Ezekre vonatkozóan Ehrenfest tételei az alábbi egyenlőségeket mondják ki:

$$\frac{d}{dt}\overline{\vec{r}} = \overline{\frac{\vec{p}}{m}}, \quad (4.2.70)$$

$$\frac{d}{dt}\overline{\vec{p}} = -\overline{\vec{\nabla}V(\vec{r})}. \quad (4.2.71)$$

A (4.2.70) állítás az állandó tömegű részecske impulzusa és sebessége közti klasszikus mechanikai összefüggés kvantummechanikai megfelelője, a (4.2.71) egyenlet pedig Newton II. törvényének kvantummechanikai analogonja. Az Ehrenfest-tételeket annak az általános összefüggésnek segítségével láthatjuk be, hogy tetszőleges f fizikai mennyiség várható értékének idő szerinti első deriváltja azonos az $\dot{f}$ operátor várható értékével:

$$\frac{d}{dt}\overline{f} = \overline{\dot{f}}, \quad \text{ahol} \quad \dot{f} = \frac{1}{i\hbar}[f, \hat{H}] + \frac{\partial f}{\partial t}. \quad (4.2.72)$$

Alkalmazzuk először ezt az összefüggést a helyzetvektor operátorának várható értékére:

$$\frac{d}{dt}\overline{\vec{r}} = \overline{\frac{1}{i\hbar}[\vec{r}, \hat{H}]} = \frac{1}{2im\hbar}\overline{[\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}}^2]}. \quad (4.2.73)$$

A jobb oldalon szereplő kommutátor Descartes-komponensei:

$$\begin{aligned} [\hat{x}_i, \hat{\vec{p}}^2] &= [\hat{x}_i, \hat{p}_i^2] = \hat{x}_i\hat{p}_i\hat{p}_i - \hat{p}_i\hat{p}_i\hat{x}_i = \hat{x}_i\hat{p}_i^2 - \hat{p}_i(\hat{x}_i\hat{p}_i - i\hbar) \\ &= i\hbar\hat{p}_i + (\hat{x}_i\hat{p}_i - \hat{p}_i\hat{x}_i)\hat{p}_i = i\hbar\hat{p}_i + i\hbar\hat{p}_i = 2i\hbar\hat{p}_i. \end{aligned} \quad (4.2.74)$$

Azt kaptuk tehát, hogy

$$\frac{d}{dt}\overline{x_i} = \frac{1}{2im\hbar}2i\hbar\overline{p_i} = \frac{1}{m}\overline{p_i}. \quad (4.2.75)$$

Vektoriális alakba visszaírva megkapjuk a (4.2.70) egyenlőséget.

Alkalmazzuk most a (4.2.72) szabályt az impulzus operátorára:

$$\frac{d}{dt}\vec{p} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}, \hat{H}] = \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}, \hat{V}]. \quad (4.2.76)$$

A jobb oldalon szereplő kommutátort koordináta-reprezentációban számoljuk ki:

$$\begin{aligned} [\hat{p}, \hat{V}] &= \frac{\hbar}{i}[\vec{\nabla}, V(\vec{r})] = \frac{\hbar}{i}\left[\vec{\nabla}V(\vec{r})\dots - V(\vec{r})\vec{\nabla}\dots\right] \\ &= \frac{\hbar}{i}\left(\vec{\nabla}V(\vec{r}) + V(\vec{r})\vec{\nabla} - V(\vec{r})\vec{\nabla}\right) = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}V(\vec{r}) \end{aligned} \quad (4.2.77)$$

Ezt felhasználva azt találjuk, hogy

$$\frac{d}{dt}\vec{p} = \frac{1}{i\hbar}\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}V(\vec{r}) = -\vec{\nabla}V(\vec{r}), \quad (4.2.78)$$

vagyis megkaptuk a (4.2.71) egyenletet.

Ehrenfest⁴⁸ tételei tehát az alábbi jelentéssel bírnak:

1. **Ha a részecske helyzetvektora várható értékének idő szerinti első deriváltját egyfajta sebességnek fogjuk fel, akkor ennek a sebességnek és a részecske (állandó) tömegének a szorzata az impulzus várható értékével egyenlő.**
2. **Ha a részecskére külső, sztatikus potenciálmező által kifejtett $\vec{F} = -\vec{\nabla}V(\vec{r})$ erő hat, akkor a részecske impulzusa várható értékének az idő szerinti első deriváltja megegyezik az $\vec{F} = -\vec{\nabla}V(\vec{r})$ erő várható értékével, akármilyen állapotban is legyen a részecske, azaz várható értékben érvényes Newton II. törvénye.**
3. **Az előző állításból következik, hogy ha a részecskére nem hat külső erő, vagyis szabad mozgást végez, akkor a részecske impulzusának a várható értéke inerciarendszerben megmaradó mennyiség. Ennek alapján dönthetjük el, hogy egy vonatkoztatási rendszer inerciarendszer vagy sem.**

4.2.6. Mikor végez a részecske a klasszikus mechanikaira emlékeztető mozgást?*

Látjuk tehát, hogy Newton második törvénye Ehrenfest második tételének alakjában érvényes a kvantummechanikában is. Legyünk azonban óvatosak a tétel következményeinek megítélésében.

⁴⁸Paul Ehrenfest (1880-1933, osztrák) fizikus, az adiabatikus invariánsok hipotézisének felállításával jelentősen hozzájárult az atomfizika fejlődéséhez. Statisztikus fizikai megfontolásai beépültek a modern, nem egyensúlyi termodinamikába.

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.**

1. **Az egyik feltétel az, hogy a potenciál gradiensének várható értéke közelítőleg egyezzen meg a potenciál gradiensének értékével a részecske helyzetvektorának várható értékének megfelelő pontban.** Ehhez természetesen térben erősen lokalizált hullámcsomaggal leírható állapotban kell előállítanunk a részecskét. Vegyük pl. az egydimenziós mozgás esetét mondjuk az x -tengely mentén. A potenciált keskeny tartójú hullámfüggvény esetén Taylor-sorba fejthetjük az x koordináta $\bar{x}$ várható értéke körül és megállhatunk a sor első néhány tagjánál:

$$V(x) = V(\bar{x}) + (x - \bar{x})V'(\bar{x}) + \frac{1}{2}(x - \bar{x})^2V''(\bar{x}) + \frac{1}{6}(x - \bar{x})^3V'''(\bar{x}) + \dots \quad (4.2.79)$$

$$-\frac{dV(x)}{dx} = -V'(\bar{x}) - (x - \bar{x})V''(\bar{x}) - \frac{1}{2}(x - \bar{x})^2V'''(\bar{x}) + \dots, \quad (4.2.80)$$

úgyhogy

$$\overline{\left(-\frac{dV(x)}{dx}\right)} = -V'(\bar{x}) - \frac{1}{2}(\Delta x)^2V'''(\bar{x}) - \dots \quad (4.2.81)$$

Innen látjuk, hogy a hullámcsomag térbeli Δx kiterjedésének olyan kicsinek kell lennie, hogy a

$$\frac{1}{2}(\Delta x)^2V'''(\bar{x}) \ll V'(\bar{x}) \quad (4.2.82)$$

feltétel teljesüljön, akkor lesz a részecskére ható erő várható értéke közel egyenlő a a részecske helyzetvektorának várható értéke által meghatározott helyen létesített erővel. Szabad részecske ($V = 0$), a nehézségi erőterben (V a koordináta lineáris függvénye) és harmonikus oszcillátor-potenciálban (V kvadratikusan függvény) ez a feltétel mindig teljesül.

2. Ha a részecske a térben lokalizált, akkor megnő a határozatlansági elv szerint az impulzusbizonytalansága: $\Delta p_x \gtrsim \frac{\hbar}{\Delta x}$. Ekkor a részecske kinetikus energiájának várható értékéhez

$$\frac{\overline{\vec{p}_x^2}}{2m} = \frac{\vec{p}_x^2}{2m} + \frac{[\Delta p_x]^2}{2m} \quad (4.2.83)$$

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:

$$\frac{\vec{p}_x^2}{2m} \gg \frac{(\Delta p_x)^2}{2m} \gtrsim \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \equiv T_{\min}. \quad (4.2.84)$$

Tehát keskeny hullámcsomag és a térbeli lokalizáltságból származó „nyüzsgés” minimális kinetikus energiáját lényegesen meghaladó kinetikus energiát biztosító, nagy átlagos impulzus szükséges ahhoz, hogy a részecske mozgása a klasszikus mozgásra emlékeztessen.

Ilyen feltételek mellett várhatjuk, hogy legalább kezdetben a mozgás emlékeztetni fog a klasszikus mechanikaira. Ahogy azonban telik az idő, a hullámcsomag szétfolyik. A szétfolyás karakterisztikus ideje

$$\tau_c \approx \frac{\hbar m}{(\Delta p_x)^2} \lesssim \frac{m(\Delta x)^2}{\hbar}. \quad (4.2.85)$$

Mivel $\hbar \approx 10^{-34}$ Js, az alábbi becsült értékeket kapjuk néhány esetben, adott m nyugalmi tömegű, Δx „kiterjedésű” részecske esetén: Ez az kis számolás jól illusztrálja, hogy egy klasszikus

Objektum	m	Δx	τ	$T_{\min}$
Föld	$6 \cdot 10^{24}$ kg	$6 \cdot 10^6$ m	$2 \cdot 10^{72}$ s	$\sim 3 \cdot 10^{-107}$ J
Ólomgolyó	1 kg	$4,5 \cdot 10^{-2}$ m	10^{30} s	$\sim 3 \cdot 10^{-66}$ J
Proton	$1,7 \cdot 10^{-27}$ kg ≈ 1 GeV/ c^2	10^{-15} m	10^{-23} s	$\sim 3 \cdot 10^{-12}$ J $\approx 0,02$ GeV/ c^2
Elektron	$9,1 \cdot 10^{-31}$ kg ≈ 511 keV/ c^2	$\lambda_C \approx 2,4 \cdot 10^{-10}$ m	$5 \cdot 10^{-16}$ s	$\sim 10^{-19}$ J $\approx 0,6$ eV/ c^2

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 a nyugalmi tömegükkel összemérhető kinetikus energiák esetén teljesülnek a klasszikus mozgás feltételei⁴⁹.

4.2.7. A Schrödinger-egyenlet és a kvantummechanika klasszikus határ-esete

Keressük az időfüggő Schrödinger-egyenlet,

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) \quad (4.2.86)$$

megoldását

$$\psi(\vec{r}, t) = A(\vec{r}, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(\vec{r}, t)\right) \quad (4.2.87)$$

⁴⁹Az elektron helybizonytalanságának becslésére az elektron $\lambda_C = \frac{h}{m_e c}$ Compton-hullámhosszát használtuk, ahol m_e az elektron nyugalmi tömege.

alakban, ahol az $A(\vec{r}, t)$ amplitúdó és az $S(\vec{r}, t)$ fázis valós függvények. Behelyettesítjük ezt a feltevést a (4.2.86) egyenletbe,

$$\begin{aligned} \left[i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} - A \frac{\partial S}{\partial t} \right] e^{\frac{i}{\hbar} S} &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \left(\vec{\nabla} A + \frac{i}{\hbar} A \vec{\nabla} S \right) + V A \right] e^{\frac{i}{\hbar} S} \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta A - 2 \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} A \cdot \frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} S \right. \\ &\quad \left. - \frac{\hbar^2}{2m} A \left(\frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} S \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} A \frac{i}{\hbar} \Delta S + V A \right] e^{\frac{i}{\hbar} S}, \quad (4.2.88) \end{aligned}$$

majd az egyenlet mindkét oldalán megjelenő $e^{\frac{i}{\hbar} S}$ komplex fázis együtthatója valós és képzetes részeinek egyenlőségét megkövetelve az alábbi parciális differenciálegyenlet-rendszert kapjuk az $A(\vec{r}, t)$ és $S(\vec{r}, t)$ valós függvényekre:

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{(\vec{\nabla})^2}{2m} + V - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta A}{A}, \quad (4.2.89)$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} = -\frac{\vec{\nabla} A \cdot \vec{\nabla} S}{m} - \frac{A \Delta S}{2m}. \quad (4.2.90)$$

Az alábbiakban megmutatjuk, hogy a (4.2.90) egyenlet azonos a valószínűségi sűrűségre vonatkozó kontinuitási egyenlettel, a (4.2.89) egyenlet pedig nem más, mint a klasszikus mechanika Hamilton-Jacobi-egyenletének kvantummechanikai általánosítása.

Vegyük észre, hogy a (4.2.87) hullámfüggvény gradiense

$$\vec{\nabla} \psi = \frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} S \psi, \quad (4.2.91)$$

és a részecske $\rho(\vec{r}, t)$ valószínűségi sűrűsége és $\vec{j}(\vec{r}, t)$ valószínűségi áramsűrűsége rendre

$$\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 = |A(\vec{r}, t)|^2, \quad (4.2.92)$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \vec{\nabla} \psi^* - \psi^* \vec{\nabla} \psi) = \frac{i\hbar}{2m} A^2 \left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} S - \frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} S \right) = \frac{A^2 \vec{\nabla} S}{m}. \quad (4.2.93)$$

Szorozzuk a (4.2.90) egyenlet mindkét oldalát balról $2A$ -val:

$$\frac{\partial A^2}{\partial t} = -\frac{\vec{\nabla} A^2 \cdot \vec{\nabla} S}{m} - \frac{A^2}{m} \Delta S = -\frac{1}{m} \vec{\nabla} (A^2 \vec{\nabla} S). \quad (4.2.94)$$

Ez az egyenlet nyilvánvalóan azonos a

$$\frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \text{div} \vec{j}(\vec{r}, t) = 0 \quad (4.2.95)$$

kontinuitási egyenlettel.

A (4.2.89) egyenlet fizikai tartalmát rögtön megértjük, ha átrendezzük:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\left(\frac{(\vec{\nabla} S)^2}{2m} + V(\vec{r})\right) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta A}{A}, \quad (4.2.96)$$

és feltesszük egy pillanatra, hogy a jobb oldalon álló $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta A}{A}$ tag elhanyagolható. Ekkor ugyanis felismerjük a klasszikus mechanika

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H(\vec{r}, \vec{\nabla} S) \quad (4.2.97)$$

alakú Hamilton-Jacobi-egyenletét, ahol $S(\vec{r}, t)$ a klasszikus hatás a mozgás valódi pályáján, mint a végponti $(\vec{r}, t)$ adatok függvénye, az úgynevezett Hamilton-Jacobi-féle korrelációs függvény, $H(\vec{r}, \vec{\nabla} S)$ pedig a klasszikus Hamilton-függvény, mint az $\vec{r}$ helyzetvektor és a hozzá kanonikusan konjugált $\vec{p} = \vec{\nabla} S$ impulzus függvénye. Azt mondhatjuk tehát, hogy a kvantummechanikai $\psi(\vec{r}, t)$ hullámfüggvény komplex fázisa a $\hbar$ egységekben mért klasszikus mechanikai Hamilton-Jacobi-függvény kvantummechanikai általánosítása. Amennyiben a hullámfüggvény A valós amplitúdója által meghatározott, tisztán kvantumfizikai eredetű $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta A}{A}$ energia-tag elhanyagolható a mozgás során a $\left(\frac{(\vec{\nabla} S)^2}{2m} + V(\vec{r})\right)$ tagokhoz képest, akkor a részecske olyan állapotban van, amelyben jó közelítéssel klasszikus mozgást végez. Hogy ennek a kvantummechanika és a klasszikus mechanika közötti átmenetnek milyen fizikai okai vannak, az ma is kutatás tárgyát képezi. Formálisan, a $\hbar \rightarrow 0$ határátmenettel térhetünk át a kvantummechanikai (4.2.89) egyenletről a klasszikus mechanikai Hamilton-Jacobi-egyenletre. Ez a formális határátmenet azonban nem fizikai válasz a kvantumból klasszikusba történő átmenetre, hiszen a természetben $\hbar \neq 0$ véges értékű.

4.2.8. Dobozba zárt részecske

1. Az időtől független Schrödinger-egyenlet és megoldása

Tegyük fel, hogy egy pont részecske szabadon mozog egy doboz belsejében. Az egyszerűség kedvéért legyen a mozgás 1-dimenziós. A dobozt olyan $V(x)$ potenciállal modellezzük, amely a doboz belsejében nulla, a doboz falainál pedig végtelen értéket vesz fel:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha } x \in (0, L) \\ +\infty, & \text{ha } x < 0 \text{ vagy } x > L \end{cases}, \quad (4.2.98)$$

ahol L a doboz oldalának hossza. A részecske Hamilton-operátora⁵⁰:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(x), \quad (4.2.100)$$

ahol m a részecske tehetetlen tömege.

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x) \quad (4.2.101)$$

alakot ölt. Mivel a potenciál a doboz falainál végtelenné válik, azért a dobozon kívül a hullámfüggvénynek azonosan el kell tűnnie. Ez a fizikailag józan feltétel összhangban van a Hamilton-operátor önadjungáltságának követelményével (ld. az erre vonatkozó fenti lábjegyzetet). Az 1-dimenziós esetben az időtől független Schrödinger-egyenlet közönséges másodrendű differenciálegyenlet, amelynek megoldása általában folytonos és folytonosan differenciálható kell legyen. A doboz határainál a potenciálnak végtelen szakadása van, így ott csak a folytonosságot követelhetjük meg. Ezért a doboz határainál a részecske hullámfüggvényének el kell tűnnie:

$$\psi(x) = 0, \quad \text{ha } x \leq 0 \quad \text{vagy } x \geq L. \quad (4.2.102)$$

Vezessük be a k „hullámszámot” a

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0 \quad (4.2.103)$$

⁵⁰Felmerülhet a kérdés, hogy a Hamilton-operátor a véges $[0, L]$ intervallum felett értelmezett négyzetesen integrálható $\psi(x)$ koordináta-hullámfüggvények tere felett vajon önadjungált vagy sem. Az $\hat{x} \rightarrow x \cdot$ koordináta-operátor véges $x \in [0, L]$ intervallum esetén is önadjungált, s így a potenciális energia $V(x)$ operátora is. A Hamilton-operátor tehát akkor és csak akkor önadjungált, ha az impulzus $\hat{p}_x \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ operátora is önadjungált. Tetszőleges $\psi(x)$ és $\phi(x)$ hullámfüggvények esetén parciális integrálással kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{p}_x | \psi \rangle^* &= \left[\int_0^L dx \phi^* \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi}{dx} \right]^* = - \int_0^L dx \phi \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi^*}{dx} \\ &= - \left[\frac{\hbar}{i} \psi(x) \psi^*(x) \right]_0^L + \int_0^L dx \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{d\phi}{dx} = - \left[\frac{\hbar}{i} \psi(x) \psi^*(x) \right]_0^L + \int_0^L dx \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{d\phi}{dx} \\ &= - \left[\frac{\hbar}{i} \psi(x) \psi^*(x) \right]_0^L + \langle \psi | \hat{p}_x | \phi \rangle. \end{aligned} \quad (4.2.99)$$

Innen látjuk, hogy az impulzus-operátor akkor és csak akkor önadjungált, ha olyan hullámfüggvényekre szorítkozunk, amelyek az intervallum határain eltűnnek. A dobozba zárt részecske Hilbert-tere tehát olyan négyzetesen integrálható függvények $L_2([0, L], dx | \psi(0) = \psi(L) = 0)$ tere, amelyek elegendően tesznek a $\psi(0) = 0$ és $\psi(L) = 0$ határfeltételeknek.

definícióval. Ekkor az időtől független (4.2.101) egyenlet

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0 \quad (4.2.104)$$

alakot ölt. Ennek az egyenletnek 2 független megoldása van, e^{ikx} és e^{-ikx} , amelyek az $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ energia-sajátértékhez tartoznak. A lineáris differenciálegyenlet általános megoldása tehát

$$\psi(x) = A_+ e^{ikx} + A_- e^{-ikx} \quad (4.2.105)$$

alakú, ahol A_+ és A_- komplex együtthatók, amelyek esetleg k -tól függhetnek. A hullámfüggvénynek ki kell elégítenie a potenciál (végtelen) szakadási helyein, azaz az $x = 0$ és az $x = L$ helyeken a folytonossági határfeltételeket:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \psi(0 + \varepsilon) = 0, \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \psi(L - \varepsilon) = 0. \quad (4.2.106)$$

Ezekből a határfeltételekből azt kapjuk, hogy

$$A_+ + A_- = 0, \quad A_+ e^{ikL} + A_- e^{-ikL} = 0. \quad (4.2.107)$$

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

$$\left| \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ e^{ikL} & e^{-ikL} \end{pmatrix} \right| = 0, \quad \rightarrow \quad e^{-ikL} - e^{ikL} = -2i \sin(kL) = 0. \quad (4.2.108)$$

A determináns csak diszkrét k_n -értékek esetén tűnik el:

$$k_n = n \frac{\pi}{L}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.2.109)$$

ahol n nem negatív egész számok. Az első határfeltételi egyenletből

$$A_- = -A_+, \quad (4.2.110)$$

úgyhogy a stacionárius Schrödinger-egyenlet megoldásai

$$\psi_n(x) = 2iA_+(k_n) \sin(k_n x) \quad (4.2.111)$$

alakúak és rendre az

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad (4.2.112)$$

diszkrét energia-sajátértékekhez tartoznak, ahol $n = 1, 2, \dots$ pozitív egész számok. Az $n = 0$ esetet ki kell zárjuk, mert ekkor a hullámfüggvény azonosan zérusnak adódna, ami nem lehet fizikai állapot, mert a normája zérus.

A normálási együtthatót $A_+(k_n)$ alakba írtuk, jelezve, hogy az esetleg függhet k_n -től.

A stacionárius hullámfüggvényeket normálhatjuk 1-re:

$$1 = 4 \int_0^L dx |A_+|^2 \sin^2(k_n x) = 4L \frac{|A_+|^2}{k_n L} \int_0^{k_n L} d\xi \sin^2 \xi = 2L |A_+|^2 \quad (4.2.113)$$

ahonnan egy lényegtelen fázisfaktor erejéig

$$A_+ = \frac{-i}{\sqrt{2L}} \quad (4.2.114)$$

adódik. Látjuk, hogy a normálási együttható nem függ n -től (azaz k_n -től). **A stacionárius megoldások ortonormált teljes rendszere tehát:**

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n \frac{\pi}{L} x\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.2.115)$$

és a megfelelő energia-sajátértékek pedig:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.2.116)$$

Az energiaspektrum tehát tisztán diszkrét, és minden energiaszinthez egyetlen bázisállapot tartozik, vagyis az energiaszintek nem elfajultak.

2. A stacionárius állapotok, mint állóhullámok

A kapott stacionárius megoldásokat kiegészítve a megfelelő, időtől függő fázis-faktorral, megkapjuk a stacionárius állapotok időtől függő hullámfüggvényeit:

$$\Psi_n(x, t) = 2iA_+(k_n) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \sin\left(n \frac{\pi}{L} x\right). \quad (4.2.117)$$

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

$$L = n \frac{\lambda}{2} \quad (4.2.118)$$

alakba írható át. Innen látjuk, hogy az n 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:

$$\begin{aligned} \Psi_n(x, t) &= A_+ e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \left[\exp\left\{in \frac{\pi}{L} x\right\} - \exp\left\{-in \frac{\pi}{L} x\right\} \right] \\ &= A_+ \left[\exp\left\{-\frac{i}{\hbar} (E_n t - k_n \hbar x)\right\} - \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} (E_n t + k_n \hbar x)\right\} \right] \end{aligned} \quad (4.2.119)$$

Ez két, egymással szembe futó, egymáshoz képest π fáziskülönbséggel találkozó, azonos amplitudójú, $\omega = E_n/\hbar$ körfrekvenciájú és $k_n\vec{e}$, ill. $-k_n\vec{e}$ hullámvektorú síkhullám szuperpozíciója, ahol $\vec{e}$ az x -tengely pozitív irányába mutató egységvektor.

Érdemes megjegyezni, hogy a dobozba zárt részecske stacionárius állapotai nem impulzus-sajátállapotok. Azt szokás mondani, hogy $p_x = \pm k_n\hbar$ a $\psi_n(x)$ stacionárius állapotú részecske **kváziimpulzusa**. A (4.2.119) egyenletből látjuk, hogy a stacionárius állapotok a $k_n\hbar$ és a $-k_n\hbar$ sajátértékhez tartozó impulzus-sajátállapotok lineáris kombinációi. Valóban igaz, hogy

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} e^{\pm i k_n x} = \pm \hbar k_n e^{\pm i k_n x}. \quad (4.2.120)$$

3. Az alapállapot energiája és a határozatlansági reláció

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

$$E_{\text{alap}} = E_{n_x=1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}. \quad (4.2.121)$$

Ez a Heisenberg-féle határozatlansági reláció következménye. Az alapállapotban levő részecske helybizonytalansága $\Delta x \sim L$, ezért az impulzus-bizonytalansága legalább $\Delta p_x \sim \frac{\hbar}{L}$ nagyságrendű, ami

$$E_0^{\text{b.}} \sim \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2mL^2} \quad (4.2.122)$$

nagyságrendű kinetikus energiát eredményez. Valójában a kinetikus energia legkisebb értéke a becsült $E_0^{\text{b.}}$ értéknél is nagyobb.

4. A stacionárius állapotok kinetikus energiája és a „nyüzsgés”

A dobozba zárt részecske impulzusának várható értéke minden stacionárius állapotban zérus:

$$\langle \psi_n | \hat{p}_x | \psi_n \rangle = \int_0^L dx \psi_{n_x}^* \hat{p}_x \psi_{n_x} = \int_0^L dx \psi_{n_x}^* \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi_{n_x} = 0. \quad (4.2.123)$$

A részecske kinetikus energiájának várható értéke

$$E_n = \langle \psi_n | \frac{\hat{p}_x^2}{2m} | \psi_n \rangle = \frac{1}{2m} \langle \psi_n | \hat{p}_x | \psi_n \rangle^2 + \frac{(\Delta p_x)^2}{2m} = \frac{(\Delta p_x)^2}{2m}, \quad (4.2.124)$$

ahol felhasználtuk a szórásnégyzet definícióját. Látjuk, hogy a részecske kinetikus energiája teljes egészében kvantum-effektusból, az impulzusának határozatlanságából származik. Ez azt jelenti, hogy **a dobozba zárt részecske kinetikus energiája nem haladó mozgásból, hanem úgy nevezett nyüzsgésből**⁵¹ származik. A hullámfüggvény „szét van kenve” az egész

⁵¹A kifejezés Károlyházy Frigyes (eredetileg Fetter Frigyes, 1929-2012) magyar fizikustól származik.

dobozban, de nem egyenletesen. Minél „hullámosabb”, annál nagyobb a deriváltból származó kinetikus energia. A részecske hullámfüggvénye állóhullámot ír le, amelynek a $[0, L]$ intervallumon belül $n - 1$ darab csomópontja van, azaz annyi, ahányadik gerjesztett állapotról van szó energia szerint növekvő sorrendben⁵².

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:

$$\begin{aligned}
 i\hbar\langle n|\hat{x}|n\rangle &= \frac{1}{2m}\langle n|x\hat{p}_x^2 - \hat{p}_x^2x|n\rangle \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^L dx \frac{2}{L}\sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right)\left[x\frac{d^2}{dx^2} - \frac{d^2}{dx^2}x\right]\sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right) \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^L dx \frac{2}{L}\sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right)\left[x\frac{d^2}{dx^2} - \left(2\frac{d}{dx} + x\frac{d^2}{dx^2}\right)\right]\sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right) \\
 &= \frac{2\hbar^2}{mL}n\frac{\pi}{L}\int_0^L dx \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right)\cos\left(n\frac{\pi}{L}x\right) = 0.
 \end{aligned} \tag{4.2.125}$$

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:

$$\begin{aligned}
 (\Delta x)^2 &= \langle n|\hat{x}^2|n\rangle - (\langle n|\hat{x}|n\rangle)^2 = \langle n|\hat{x}^2|n\rangle - \frac{L^2}{4}, \\
 (\Delta p_x)^2 &= \langle n|\hat{p}_x^2|n\rangle - (\langle n|\hat{p}_x|n\rangle)^2 = \langle n|\hat{p}_x^2|n\rangle,
 \end{aligned} \tag{4.2.126}$$

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

$$\begin{aligned}
 \langle n|\hat{x}|n\rangle &= \frac{2}{L}\int_0^L dx x \sin^2\left(n\frac{\pi}{L}x\right) \\
 &= \frac{1}{L}\int_0^L dx x \left[1 - \cos\left(n\frac{2\pi}{L}x\right)\right] = \frac{L}{2} - \frac{1}{2n\pi}\left[x\sin\left(n\frac{2\pi}{L}x\right)\Big|_0^L - \int_0^L dx \sin\left(n\frac{2\pi}{L}x\right)\right] \\
 &= \frac{L}{2} + \frac{L}{4n^2\pi^2}\cos\left(n\frac{2\pi}{L}x\right)\Big|_0^L \\
 &= \frac{L}{2}.
 \end{aligned} \tag{4.2.127}$$

Az impulzus négyzetének várható értéke:

$$\langle n|\hat{p}_x^2|n\rangle = 2mE_n = \frac{\hbar^2\pi^2n^2}{L^2}. \tag{4.2.128}$$

⁵²Ez a pont részecske 1-dimenziós mozgására általánosan érvényes csomóponti tétel következménye, amely szerint, ha a részecske gerjesztett (stacionárius) állapotait energia szerint növekvő sorrendben sorsámozzuk, 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 doboz belsejében található csomópontokat kell beleszámolni, azaz a határokon elhelyezkedőket nem.

A helykoordináta négyzetének a várható értéke:

$$\begin{aligned}
\langle n | \hat{x}^2 | n \rangle &= \frac{2}{L} \int_0^L dx x^2 \sin^2\left(n \frac{\pi}{L} x\right) \\
&= \frac{1}{L} \int_0^L dx x^2 \left[1 - \cos\left(n \frac{2\pi}{L} x\right) \right] \\
&= \frac{L^2}{3} - \frac{1}{2n\pi} \left[x^2 \sin\left(n \frac{2\pi}{L} x\right) \Big|_0^L - \int_0^L dx 2x \sin\left(n \frac{2\pi}{L} x\right) \right] \\
&= \frac{L^2}{3} - \frac{L}{4n^2\pi^2} \left[2x \cos\left(n \frac{2\pi}{L} x\right) \Big|_0^L - 2 \int_0^L dx \cos\left(n \frac{2\pi}{L} x\right) \right] \\
&= \frac{L^2}{3} - \frac{L^2}{2n^2\pi^2}.
\end{aligned} \tag{4.2.129}$$

Ezért

$$(\Delta x)^2 = \frac{1}{12} L^2 \left(1 - \frac{6}{n^2\pi^2} \right) \tag{4.2.130}$$

szigorúan monoton növekszik, ahogy egyre magasabban gerjesztett állapotokat nézünk és aszimptotikusan tart a $(\Delta x)^2 = \frac{1}{12} L^2$ értékhez, ha $n \rightarrow \infty$, míg az impulzus szórásnégyzete n^2 -tel arányosan, minden határon túl nő az $n \rightarrow \infty$ limeszben. Ugyanakkor a hely és az impulzusbizonytalanság szorzata a

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{\hbar\pi}{\sqrt{12}} n \sqrt{1 - \frac{6}{n^2\pi^2}} \geq \frac{\hbar\pi}{\sqrt{12}} \sqrt{1 - \frac{6}{\pi^2}} \tag{4.2.131}$$

egyenlőtlenségnek tesz eleget. Látjuk, hogy az alapállapotban a legkisebb a hely és az impulzus bizonytalanságának szorzata és teljesül a határozatlansági reláció.

5. A stacionárius állapotok paritása

A dobozba zárt részecske problémájának Hamilton-operátora szimmetrikus a „potenciálgödör” $x = L/2$ felező pontjára történő tükrözéssel szemben. Ezt a szimmetriát jobban tudjuk szemléltetni, ha eltoljuk az x -tengely origóját az $x' = x - \frac{L}{2}$ transzformációval. Az x' -tengely origóra történő tükrözésének $x' \rightarrow -x'$ transzformációját jelöljük $\hat{\Pi}$ -vel. A potenciális energia az x' koordináta páros függvénye, $V(x') = V(-x')$, az impulzus-operátor pedig $\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx'}$. A $\hat{\Pi}$ transzformáció hatására az impulzus-operátor előjelet vált, a potenciális energia operátora pedig invariáns marad. Következésképpen a $\hat{H}$ Hamilton-operátor invariáns a $\hat{\Pi}$ transzformációval szemben. Vizsgáljuk meg, hogyan viselkednek az origóra történő tükrözés során a stacionárius állapotok hullámfüggvényei, amelyek

$$\begin{aligned}
\psi_n(x') &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n \frac{\pi}{L} \left(x' + \frac{L}{2}\right)\right) \\
&= \sqrt{\frac{2}{L}} \left[\sin\left(n \frac{\pi}{L} x'\right) \cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) + \cos\left(n \frac{\pi}{L} x'\right) \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \right]
\end{aligned} \tag{4.2.132}$$

alakúak az x' koordináták függvényeiként. Ha $n = 2\nu - 1$ páratlan szám, ahol $\nu = 1, 2, \dots$, akkor a jobb oldalon az első tag zérus, és azt találjuk, hogy

$$\psi_n(x') = -(-1)^\nu \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(n\frac{\pi}{L}x'\right), \quad n = 2\nu - 1 = 1, 3, 5, \dots \quad (4.2.133)$$

Ekkor a hullámfüggvény páros függvény és

$$\hat{\Pi}\psi_n(x') = \psi_n(-x') = \psi_n(x'), \quad \text{ha } n \text{ páratlan.} \quad (4.2.134)$$

Látjuk, hogy a páratlan n -hez tartozó stacionárius állapotok hullámfüggvényei a $\hat{\Pi}$ operátor $\Pi = +1$ sajátértékhez tartozó sajátfüggvényei. Ha $n = 2\nu$ páros szám, ahol $\nu = 1, 2, \dots$, akkor a megfelelő stacionárius állapotok hullámfüggvényei

$$\psi_n(x') = (-1)^\nu \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n\frac{\pi}{L}x'\right), \quad n = 2\nu = 2, 4, \dots \quad (4.2.135)$$

alakúak, vagyis páratlan függvények, amelyek az x' -tengely origóra történő tükrözése során előjelet váltanak:

$$\hat{\Pi}\psi_n(x') = \psi_n(-x') = -\psi_n(x'), \quad \text{ha } n \text{ páros.} \quad (4.2.136)$$

Innen leolvassuk, hogy a páros n -hez tartozó stacionárius állapotok hullámfüggvényei a $\hat{\Pi}$ operátor $\Pi = -1$ sajátértékéhez tartozó sajátfüggvényei. Az itt szereplő $\hat{\Pi}$ operátor a 3-dimenziós tér origóra történő tükrözésének, a tértükrözésnek az 1-dimenziós megfelelője. A $\hat{\Pi}$ operátor sajátértékét **paritásnak** nevezzük. A fentiekben beláttuk, hogy az 1-dimenziós dobozba zárt részecske stacionárius állapotainak hullámfüggvényei közös sajátfüggvényei a Hamilton-operátornak és a tértükrözés operátorának. A stacionárius állapotok tehát jól definiált paritással rendelkeznek: az alapállapot és növekvő energia szerinti sorrendben minden második gerjesztett állapot $+1$ paritású, míg (ugyanebben a sorrendben) az 1., a 3. stb. gerjesztett állapot -1 paritású.

6. Általánosítás 3-dimenziós esetre

A kapott megoldást könnyű 3-dimenziós dobozba zárt részecskére általánosítani. A részecske Hamilton-operátorában a Descartes-féle koordinátarendszer független irányokban történő mozgások koordinátái (pontosabban a megfelelő impulzuskomponensek operátorai) különböző tagokban, szeparáltan fordulnak elő,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}. \quad (4.2.137)$$

Az impulzus-operátor Descartes-komponenseinek és így a Hamilton-operátornak az önadjungáltsága megköveteli, hogy a hullámfüggvény a doboz falainál

tűnjön el. A határfeltételek miatt a $\vec{k}$ hullámvektor valamennyi Descartes-komponense csak olyan diszkrét értékeket vehet fel, hogy az x -, y - és z -irányban a félhullámhossz egész számszor férjen rá a doboz megfelelő irányú élére, vagyis $k_i = n_i \frac{\pi}{L_i}$ legyen, ahol L_i ($i = x, y, z$) a téglatest alakú doboz élhosszai és n_i ($i = x, y, z$) nem negatív egész számok lehetnek. A fentiek miatt a részecske hullámfüggvénye az x -, az y - és a z -irányú, független mozgásokat leíró hullámfüggvények szorzata:

$$\begin{aligned}\psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) &= \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(n_x \frac{\pi}{L_x} x\right) \sin\left(n_y \frac{\pi}{L_y} y\right) \sin\left(n_z \frac{\pi}{L_z} z\right), \\ E_{n_x, n_y, n_z} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right).\end{aligned}\quad (4.2.138)$$

Az energia-sajátértékeket az (n_x, n_y, n_z) számhármass jellemzi, ahol az $n_x = n_y = n_z = 0$ esetet ki kell zárjuk.

4.2.9. A dobozba zárt részecske problémája, mint határeset

Esetleg kétségeink lehetnek, hogy vajon a végtelen nagy potenciálfallal határolt intervallumban mozgó m tömegű részecske stacionárius állapotait az előző fejezetben helyesen határoztuk meg, azaz hogy a potenciál végtelen ugrását helyesen kezeltük az időtől független Schrödinger-egyenlet megoldása során. A kapott eredmények helyességének alátámasztása érdekében megkísérelhetjük, hogy az intervallum határain csak véges $V_0 > 0$ potenciálugrást tételezünk fel, megkeressük a stacionárius állapotokat, majd megvizsgáljuk a $V_0 \rightarrow \infty$ határesetet. Azt reméljük, hogy ebben a határesetben visszkapjuk majd az előző fejezetben ismertetett eredményeket.

Keressük tehát az m tömegű részecske stacionárius állapotait véges, $V_0 > 0$ „magasságú” potenciálgödörben 1-dimenziós esetben. Legyen a potenciális energia, mint az x koordináta⁵³ függvénye:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha } -a \leq x \leq a, & I \\ V_0 & \text{ha } x < -a, & II \\ V_0 & \text{ha } x > a, & III \end{cases}, \quad (4.2.139)$$

ahol római számokkal jelöltük meg az egyes intervallumokat, amelyekben a potenciális energia állandó. Az időtől független Schrödinger-egyenlet,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x), \quad (4.2.140)$$

⁵³Az itt használt x koordináta az előző fejezetben bevezetett x' koordinátának felel meg.

ahol $\psi''(x) = \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$. Amennyiben stacionárius állapotokat keresünk, akkor a stacionárius Schrödinger-egyenlet olyan megoldásait keressük, amelyek $0 \leq E < V_0$ energiához tartoznak.

A (4.2.140) egyenlet közönséges másodrendű, lineáris, változó együtthatós differenciálegyenlet. A $\psi(x)$ együtthatója, a potenciál nem folytonos függvény, hanem az $x_{\pm} = \pm a$ pontokban véges szakadása van. A keresett $\psi(x)$ hullámfüggvényről feltesszük, hogy folytonos, és megmutatjuk, hogy a szakadási helyeken is folytonosan deriválható. Vegyük pl. az $x_+ = a$ szakadási helyet, és integráljuk a (4.2.140) egyenlet mindkét oldalát x szerint az $[a - \varepsilon, a + \varepsilon]$ intervallumon, ahol $\varepsilon \rightarrow 0^+$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx \psi''(x) = \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx [E - V(x)] \psi(x). \quad (4.2.141)$$

A bal oldalon a Newton-Leibnitz-szabályt alkalmazva elvégzzük az integrálást, a jobb oldalon az E -t tartalmazó tagot az integrálközéptétel segítségével értékeljük ki, a másik tagban pedig az integrált az $[a - \varepsilon, a]$ és az $[a, a + \varepsilon]$ intervallumok feletti integrálok összegére bontjuk és azután alkalmazzuk az integrálközéptétel-tételt. Végül tartsunk ε -nal nullához. Ekkor azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left[\psi'(x) \right]_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left(E 2\varepsilon \psi(a) - V_0 \int_a^{a+\varepsilon} dx \psi(x) \right) \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left(E 2\varepsilon \psi(a) - V_0 \varepsilon \psi(a) \right). \end{aligned} \quad (4.2.142)$$

Végezzük el most az $\varepsilon \rightarrow 0^+$ határátmenetet, akkor V_0 végessége miatt a jobb oldalon zérust kapunk. Mivel a bal oldalon a $-\frac{\hbar^2}{2m}$ szorzótényező véges, azt találjuk, hogy $\psi'(a + \varepsilon) = \psi'(a - \varepsilon)$, ha $\varepsilon \rightarrow 0^+$, vagyis a $\psi' = \frac{d\psi(x)}{dx}$ első derivált folytonos a potenciál véges szakadási helyén az $x_+ = a$ pontban. Ugyanígy láthatnánk be, hogy az $x_- = -a$ szakadási helyen is folytonosan differenciálható a hullámfüggvény. Megjegyezzük, hogy a potenciálfüggvény alakját nem használtuk ki a bizonyítás során. Ezért azt, hogy a stacionárius állapotok hullámfüggvénye a potenciál bármely véges szakadási helyén folytonosan differenciálható, hasonlóan láthatjuk be tetszőleges alakú potenciál esetén. Vegyük észre azt is, hogy amennyiben $V_0 \rightarrow \infty$, azaz a potenciál ugrása végtelen a szakadási helyen, akkor a (4.2.142) egyenlet jobb oldalán a $V_0 \varepsilon$ kifejezés határértéke rosszul definiált, és ennek következtében a hullámfüggvény folytonos differenciálhatóságának a követelménye elesik. Azt ezért nem kellett megkövetelnünk az előző fejezetben tárgyalt esetben.

Ilyen előzmények után térjünk rá a (4.2.140) egyenlet tényleges megoldására a $0 \leq E < V_0$ feltétel mellett. Az egyenlet explicit alakja a *I* és a *II* és *III* tartományokban rendre:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = E\psi, \quad \text{ha } x \in I, \quad (4.2.143)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = -(V_0 - E)\psi, \quad \text{ha } x \in II, III. \quad (4.2.144)$$

Vezessük be az alábbi valós, nem negatív paramétereket:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, \quad (4.2.145)$$

amelyek az egyelőre meghatározatlan E energia függvényei. Ekkor az időtől független Schrödinger-egyenlet az egyes intervallumokon az alábbi alakot ölti:

$$\psi'' + k^2\psi = 0, \quad \text{ha } x \in I, \quad (4.2.146)$$

$$\psi'' - \kappa^2\psi = 0, \quad \text{ha } x \in II, III. \quad (4.2.147)$$

Ezért a differenciálegyenlet független megoldásai az egyes szakaszokon:

$$\cos(kx), \quad \sin(kx), \quad \text{ha } x \in I, \quad (4.2.148)$$

$$e^{\kappa x}, \quad e^{-\kappa x}, \quad \text{ha } x \in II, III. \quad (4.2.149)$$

Következésképpen az egyenlet általános megoldása az egyes szakaszokon az alábbi alakú:

$$\psi_I(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx), \quad \text{ha } x \in I, \quad (4.2.150)$$

$$\psi_{II}(x) = C e^{\kappa x} + C' e^{-\kappa x}, \quad \text{ha } x \in II, \quad (4.2.151)$$

$$\psi_{III}(x) = D e^{-\kappa x} + D' e^{\kappa x}, \quad \text{ha } x \in III, \quad (4.2.152)$$

ahol A, B, C, C', D, D' egyelőre ismeretlen valós együtthatók. A hullámfüggvény négyzetesen integrálható kell legyen, ami azt jelenti, hogy az $|x| \rightarrow \infty$ határesetben nullához kell tartania, vagyis olyan megoldásokat kell keresnünk, amelyek eleget tesznek a

$$\psi_{II}(x \rightarrow -\infty) = 0 \quad \text{és} \quad \psi_{III}(x \rightarrow \infty) = 0 \quad (4.2.153)$$

határfeltételeknek, amelyekből azonnal következik, hogy $C' = D' = 0$. A hullámfüggvény folytonossága és folytonos differenciálhatósága a potenciál $x_{\pm} = \pm a$ szakadási helyein az alábbi határfeltételeket eredményezi:

$$\psi_{II}(-a) = \psi_I(-a), \quad \psi_I(a) = \psi_{III}(a), \quad (4.2.154)$$

$$\psi'_{II}(-a) = \psi'_I(-a), \quad \psi'_I(a) = \psi'_{III}(a). \quad (4.2.155)$$

Írjuk ki ezeket részletesen:

$$C e^{-\kappa a} = A \cos(ka) - B \sin(ka), \quad (4.2.156)$$

$$\kappa C e^{-\kappa a} = A k \sin(ka) + B k \cos(ka), \quad (4.2.157)$$

$$D e^{-\kappa a} = A \cos(ka) + B \sin(ka), \quad (4.2.158)$$

$$-\kappa D e^{-\kappa a} = -A k \sin(ka) + B k \cos(ka). \quad (4.2.159)$$

Ezekhez még hozzá kell vegyük a hullámfüggvény normálását:

$$\begin{aligned}
1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 \\
&= \int_{-\infty}^{-a} dx |\psi_{II}(x)|^2 + \int_{-a}^a dx |\psi_I(x)|^2 + \int_a^{\infty} |\psi_{III}(x)|^2. \quad (4.2.160)
\end{aligned}$$

Összesen van tehát 5 darab egyenletünk 5 darab ismeretlen állandó, A , B , C , D és az E energia meghatározására. A (4.2.156)-(4.2.159) homogén lineáris egyenletrendszer gyökeit most nem a formális módszerrel keressük meg. Ehelyett származtassunk le belőle az eredetivel ekvivalens egyenletrendszert. Vegyük rendre a (4.2.156) és a (4.2.158) egyenletek megfelelő oldalainak az összegét, vonjuk ki a (4.2.157) egyenlet oldalaiból a (4.2.159) egyenlet megfelelő oldalait, vonjuk ki a (4.2.156) egyenlet oldalaiból a (4.2.158) egyenlet megfelelő oldalait, és végül adjuk össze a (4.2.157) egyenlet és a (4.2.159) egyenlet megfelelő oldalait; ekkor az alábbi egyenletrendszert kapjuk:

$$(C + D)e^{-\kappa a} = 2A \cos(ka), \quad (4.2.161)$$

$$\kappa(C + D)e^{-\kappa a} = 2Ak \sin(ka), \quad (4.2.162)$$

$$(C - D)e^{-\kappa a} = -2B \sin(ka), \quad (4.2.163)$$

$$\kappa(C - D)e^{-\kappa a} = 2Bk \cos(ka). \quad (4.2.164)$$

Némi ötletességgel beláthatjuk, hogy a megoldásoknak 2 osztálya van:

- Ha $C + D \neq 0$ és $A \neq 0$, akkor elosztva egymással a (4.2.162) egyenlet és a (4.2.161) egyenlet megfelelő oldalait, kapjuk, hogy

$$\kappa = ktg(ka). \quad (4.2.165)$$

Ez az E energia meghatározására szolgáló egyenlet. A (4.2.163) és (4.2.164) egyenletek kielégülnek, ha $D = C$ és $B = 0$. Ha vannak a (4.2.165) egyenletnek gyökei, akkor az azokhoz tartozó hullámfüggvények

$$\psi_I(x) = A \cos(kx), \quad \psi_{II} = Ce^{\kappa x}, \quad \psi_{III}(x) = Ce^{-\kappa x} \quad (4.2.166)$$

alakúak. Az ilyen típusú stacionárius állapotok hullámfüggvényei páros függvények: $\psi(-x) = \psi(x)$, és ezek az állapotok $\Pi = +1$ paritásúak.

- Ha $C - D \neq 0$ és $B \neq 0$, akkor a (4.2.164) és a (4.2.163) egyenletek megfelelő oldalait elosztva egymással kapjuk, hogy

$$\kappa = -kctg(ka) \quad (4.2.167)$$

az E energia-sajátértékeket meghatározó egyenlet. Ekkor a (4.2.161) és a (4.2.162) egyenlet kielégül, ha $D = -C$ és $A = 0$. Ha vannak a (4.2.167)

egyenletnek gyökei, akkor a megfelelő energia-sajátértékekhez tartozó stacionárius állapotok hullámfüggvényei

$$\psi_I(x) = B \sin(kx), \quad \psi_{II}(x) = Ce^{\kappa x}, \quad \psi_{III}(x) = -Ce^{-\kappa x} \quad (4.2.168)$$

alakúak. Ezek a hullámfüggvények páratlan függvények, $\psi(-x) = -\psi(x)$, úgyhogy a megfelelő stacionárius állapotok $\Pi = -1$ paritásúak.

Ezzel megkaptuk a (4.2.156)-(4.2.159) homogén lineáris egyenletrendszer összes megoldását⁵⁴. Látjuk, hogy a megoldásoknak az egyik osztálya pozitív, a másik osztálya negatív paritású.

Mielőtt az energia-sajátértékek meghatározásával foglalkoznánk, vegyünk észre egy lényeges különbséget a véges V_0 esete és a $V_0 \rightarrow \infty$ határeset között. Az utóbbi esetben a részecske csak a $[-a, a]$ intervallumban tartózkodhat, mert a hullámfüggvénye az intervallumon kívül azonosan eltűnik. Ha azonban a potenciálgödör véges magasságú, akkor a hullámfüggvény a $[-a, a]$ intervallumban sem nulla, hanem exponenciálisan cseng le a II és a III tartományban. A kvantummechanika szerint tehát a részecske behatol azokba a tartományokba is, amelyekben a klasszikus mechanika szerint nem tartózkodhatna, mert ott a kinetikus energiája negatív lenne.

Térjünk most rá a (4.2.165) és (4.2.167) egyenletek megoldására. Ezeknek a trigonometrikus egyenleteknek a gyökei analitikusan nem találhatók meg, csak numerikusan. A gyökök megkeresésében segít azonban, ha grafikus eljárást használunk.

⁵⁴A (4.2.156)-(4.2.159) homogén lineáris egyenletrendszernek akkor és csak akkor van nem triviális megoldása, ha a determinánsa zérus:

$$\begin{aligned} 0 &= \det \begin{pmatrix} \cos(ka) & -\sin(ka) & -e^{\kappa a} & 0 \\ k \sin(ka) & k \cos(ka) & -\kappa e^{-\kappa a} & 0 \\ \cos(ka) & \sin(ka) & 0 & -e^{-\kappa a} \\ -k \sin(ka) & k \cos(ka) & 0 & \kappa e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \\ &= 2e^{-2\kappa a} \left[\kappa k \left(\cos^2(ka) - \sin^2(ka) \right) + (\kappa^2 - k^2) \cos(ka) \sin(ka) \right]. \end{aligned} \quad (4.2.169)$$

Könnyen látható, hogy ha akár $\cos(ka) = 0$, akár $\sin(ka) = 0$, akkor ellentmondásra jutunk. Ha sem $\cos(ka)$, sem $\sin(ka)$ nem zérus, akkor viszont a szögletes zárójeles kifejezést

$$\begin{aligned} \left[\dots \right] &= \cos(ka) \sin(ka) \left[\kappa^2 - k^2 + \kappa k \left(\operatorname{ctg}(ka) - \operatorname{tg}(ka) \right) \right] \\ &= \cos(ka) \sin(ka) \left(\kappa + k \operatorname{ctg}(ka) \right) \left(\kappa - k \operatorname{tg}(ka) \right) \end{aligned} \quad (4.2.170)$$

alakba írhatjuk. Ezért a determináns eltűnésének megkövetelése vagy a (4.2.165), vagy a (4.2.167) egyenlet teljesülésével ekvivalens. Ezen egyenletek gyökei szolgáltatják tehát valóban az összes lehetséges energia-sajátértéket. Az energia-sajátértékeket egyesével visszahelyettesítve a (4.2.156)-(4.2.159) egyenletekbe meghatározhatjuk mindegyikhez a megfelelő C/A , ill. C/B hányadosokat. Végül A , mint normálási tényező, meghatározható a (4.2.160) normálási feltételből.

Vezessük be a $\xi = ka > 0$ és az $\eta = \kappa a > 0$ „koordinátákat”, amelyekre k és κ definíciójából következően teljesül, hogy

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \equiv R^2. \quad (4.2.171)$$

A (4.2.165) és (4.2.167) egyenletek gyökei tehát a (ξ, η) -síkon az R sugarú köríven helyezkednek el a $(\xi > 0, \eta > 0)$ síknegyedben. A (4.2.165) és (4.2.167) egyenleteket a -val szorozva kapjuk, hogy

$$\eta = \xi \operatorname{tg} \xi \equiv \eta_+(\xi), \quad (4.2.172)$$

ill.

$$\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi \equiv \eta_-(\xi). \quad (4.2.173)$$

A (4.2.172) és a (4.2.173) egyenlőségek által meghatározott $\eta_{\pm}(\xi)$ függvényeket ábrázoljuk a $(\xi > 0, \eta > 0)$ síknegyedben. Az $\eta_{\pm}(\xi)$ függvénygörbéknek megszámlálhatóan végtelen sok ága helyezkedik el a $(\xi > 0, \eta > 0)$ síknegyedben. Ezeknek a görbeágaknak és az R sugarú körívnek a metszéspontjai szolgáltatják a megoldásokat. Az $\eta_+(\xi)$ függvénynek zéruspontjai vannak a $\xi = 0, \pi, 2\pi, \dots$ helyeken, és a függvénygörbék innen kiinduló ágai szigorúan monoton növekedve $+\infty$ -hez tartanak, ahogy a növekvő ξ rendre tart a $\xi = (2n-1)\frac{\pi}{2}$ helyekhez, ahol $n = 1, 2, \dots$. Az $\eta_-(\xi)$ függvénynek zérushelyei vannak a $\xi = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \dots$ helyeken, és a függvénygörbék onnan kiinduló ágai szigorúan monoton növekedő értékeken át tartanak $+\infty$ -hez, ha a növekvő ξ rendre tart a $\xi = 2n\frac{\pi}{2}$ helyekhez, ahol $n = 1, 2, \dots$.

Ha a potenciálgödör nagyon sekély, akkor csak egyetlen pozitív paritású állapotnak megfelelő gyök van, ami az alapállapotnak felel meg. Ahogy nő R azaz pl. a V_0 potenciálugrás értéke, úgy az $\eta_{\pm}(\xi)$ függvénygörbék egyre több, a $(\xi > 0, \eta > 0)$ síknegyedben fekvő ága metsz bele a körívbe, egyre több gyököt kapunk: az alapállapot mellett egyre több gerjesztett állapot jelenik meg. Végül amikor $V_0 \rightarrow \infty$, akkor a körív sugara is végtelenhez tart és az $\eta_{\pm}(\xi)$ függvénygörbék minden, a $(\xi > 0, \eta > 0)$ síknegyedben fekvő ága belemetsz a körívbe. Ráadásul ekkor a metszéspontok pontosan azokra a $\xi_n = k_n a = n\frac{\pi}{2}$ ($n = 1, 2, \dots$) helyekre tolódnak, ahol $\eta_{\pm}$ tart $+\infty$ -hez. Így a (4.2.165) egyenlet, ill. a (4.2.167) egyenlet gyökeiként rendre visszakapjuk a végtelen falú potenciáldobozba zárt részecske pozitív és negatív paritású stacionárius állapotainak energiáit a $k_n = n\frac{\pi}{L}$ feltételből, ahol $L = 2a$ a doboz szélessége és $n = 1, 2, \dots$. Ha elvégezzük az $x' = x + a$ transzformációt, akkor az $n = 1, 3, \dots$ indexű, páros paritású állapotok hullámfüggvényei

$$\psi(x) = \lim_{V_0 \rightarrow \infty} \psi_I(x) = A \cos\left(n\frac{\pi}{L}x\right) = -A \sin\left(n\frac{\pi}{L}x'\right) \sin\left(n\frac{\pi}{2}\right), \quad (4.2.174)$$

az $n = 2, 4, \dots$ indexű, páratlan paritású állapotok hullámfüggvényei pedig

$$\psi(x) = \lim_{V_0 \rightarrow \infty} \psi_I(x) = B \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right) = B \sin\left(n\frac{\pi}{L}x'\right) \cos\left(n\frac{\pi}{2}\right) \quad (4.2.175)$$

alakot öltenek, ami egységnyi abszolút értékű fázisfaktortól eltekintve azonos ezen hullámfüggvényeknek az előző fejezetben kapott alakjával. Beláttuk tehát, hogy a vizsgált véges mélységű potenciálgödör problémájának határeseteként megkapjuk a végtelen mély potenciálgödörbe zárt részecske stacionárius állapotainak jellemzőit.

4.2.10. Az egy-dimenziós mozgásra vonatkozó időtől független Schrödinger-egyenlet megoldásairól

1. Általános megjegyzések az egy-dimenziós mozgásra vonatkozóan

Az előző fejezetben olyan problémát tanulmányoztunk, amikor a stacionárius állapotok egyúttal **kötött állapotok** is voltak. A $\psi(x)$ hullámfüggvény és a részecske megtalálásának $\rho(x) = |\psi(x)|^2$ valószínűsége ilyen esetben általában csak a tér egy korlátos tartományában különbözik jelentősen zérustól, azon kívül exponenciálisan lecseng. Fenti példánkban, amikor a vizsgált tartományon kívül végtelen a potenciál, a hullámfüggvény végtelenben történő lecsengése nem jelenhet meg, mert a hullámfüggvény nem tud behatolni oda, ahol a potenciál értéke plusz végtelenhez tart. A kötött állapotok energiaspektruma diszkrét. Most olyan esetet fogunk vizsgálni, amikor a stacionárius állapotok nem kötött, hanem úgynevezett **szórási állapotok**. Ilyenkor az energiaspektrum folytonos. Azért nevezzük az állapotot szórási állapotnak, mert segítségével azt a kísérleti elrendezést szeretnénk (egyelőre egy-dimenziós esetben) vizsgálni, hogy a részecske a végtelenben még lényegében szabad részecskeként elindul, befut abba a tartományba, ahol a potenciál lényegesen különbözik nullától, majd a potenciállal kölcsönhatva, azon szóródva vagy tovább halad, vagy visszaverődik. Nevezzük kölcsönhatási tartománynak azt az intervallumot, amelyben a potenciál lényegesen különbözik nullától. A részecske a kölcsönhatási tartománytól távol lényegében szabad részecskeként viselkedik. Azt mondjuk, hogy a részecske **aszimptotikusan szabad** a kölcsönhatási tartománytól nagy távolságban. Ezért azt várjuk, hogy a befutó részecskét a kölcsönhatási tartománytól távol pl. jobbra haladó de Broglie-féle síkhullám írja le. Majd aztán a visszavert részecskének és a kölcsönhatási tartományon áthaladó részecskének rendre balra és jobbra haladó síkhullám felel meg a kölcsönhatási tartománytól távol, amikor a részecske ismét aszimptotikusan szabadnak tekinthető. (Hasonlóan lehetséges az is, hogy a befutó részecske $x \rightarrow +\infty$ -ből indul és balra haladó hullám írja le. Ekkor értelemszerűen a visszavert hullám jobbra, a kölcsönhatási tartományon átérésztett hullám balra halad.) A stacionárius állapotok nyelvén ez azt jelenti, hogy a „befutási oldalon” a bejövő hullám mellett egy visszavert hullámnak is jelen kell lennie, míg a „másik oldalon” csak a tovább haladó, átérésztett hullám van jelen. Ennek megfelelően kell megválasztani a stacionárius hullámfüggvényre vonatkozóan az $|x| \rightarrow \infty$ aszimptotikus tartományban megfogalmazott határfeltételt.

2. Az energiaspektrum

A matematikai bizonyítást mellőzve érdemes néhány fontos dolgot elmondani arról, hogy milyen tulajdonságúak az egy darab részecske potenciális energia-mezőben történő egy-dimenziós mozgására vonatkozó stacionárius Schrödinger-egyenlet megoldásai. Támpontul a megfelelő klasszikus mechanikai mozgás jellemzői szolgálhatnak.

- A klasszikus mechanikában a részecske $T(x)$ kinetikus energiájának a pálya minden pontjában nem negatívnak kell lennie, azaz $T(x) = E - U(x) \geq 0$, ahol E a részecske megmaradó energiája, $U(x)$ a részecske potenciális energiája. Ebből következik, hogy $E \geq U(x) \geq U_{\min}$, ahol $U_{\min}$ a potenciális energia pontos alsó korlátja (ami lehet véges, de akár mínusz végtelen is), azaz mozgás csak olyan E energiával lehetséges, amelynek értéke nem kisebb, mint a potenciális energia minimális értéke. Az $E \geq U_{\min}$ energia a klasszikus mechanikában tetszőleges számértéket felvehet. A klasszikus energiaspektrum folytonos és alulról korlátos, ha $U_{\min}$ véges. A kvantummechanikában az energiaspektrum lehet folytonos és diszkrét (alább erre még visszatérünk). A spektrum alulról korlátos, továbbra is eleget tesz az $E \geq U_{\min}$ egyenlőtlenségnek, ha azonban a spektrum alján a legkisebb E érték(ek) kötött állapot(ok)hoz tartozik (tartoznak), akkor az egyenlőség nem valósulhat meg (ld. még alább).
- A klasszikus mechanikában meghatározó szerepe van a klasszikus pálya fordulópontjainak, amelyekben eltűnik a részecske kinetikus energiája, vagyis azokban az x_i pontokban, amelyekben $U(x_i) = E$. A klasszikus mozgás fordulópontjai segíthetnek a kvantummechanikai stacionárius állapotok jellegének megértésében, noha elveszítik közvetlen jelentésüket. Az alábbiakban a „potenciálgödör” és a „potenciálgát” egyszerű modelljeinek esetében bizonyítás nélkül ismertetjük a stacionárius állapotok természetét, és hasonlítjuk össze a klasszikus mechanikai és a kvantummechanikai mozgást.
 - (a) Tegyük fel, hogy olyan „potenciálgödörrel” van szó, amelyre $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} U(x) = U_{\pm}$ és $U_- < U_+$, továbbá a potenciál egyetlen szélsőértékkel rendelkezik, ami lokális minimumhely: $U(x_{\min}) = U_{\min} < U_-$, és $U(x)$ a $(-\infty, x_{\min}]$ és az $[x_{\min}, \infty)$ intervallumokon rendre szigorúan monoton csökken, ill. nő. Ha az energia az $U_{\min} \leq E < U_-$ egyenlőtlenséget teljesíti, akkor két klasszikus fordulópont létezik, $x_- \leq x_+$, és a részecske korlátos mozgást végez az $x \in [x_-, x_+]$ intervallumban. Ha $E = U_{\min}$, akkor a mozgás intervalluma egyetlen pontra, az $x = x_{\min}$ minimumhelyre szűkül le, amelyben a részecske nyugalomban van, Ez a klasszikus esetben az alapállapot. Az időtől független Schrödinger-egyenletnek az $U_{\min} \leq E < U_-$ energiaintervallumban csak diszkrét E_n energiák esetén van megoldása. Ezek az

energiaszintek nem elfajultak, s így növekvő energiájuk sorrendje szerint indexelhetők: $E_0 < E_1 < E_2 < \dots$. A hullámfüggvény abszolút értékének négyzete ilyenkor egy korlátos tartományon, nagyjából a két klasszikus fordulópont közötti intervallumban különbözik csak lényegesen zérustól. Ezeket az állapotokat nevezzük kötött állapotoknak. Minél nagyobb azonban a kötött állapot energiája, annál jobban „túlnyúlik” a hullámfüggvény az adott E energiához klasszikus mozgás $[x_-, x_+]$ intervallumán. A stacionárius kötött állapotokban a részecske impulzusának várható értéke zérus, ezért kinetikus energiájának várható értéke teljes egészében a Δp_x impulzusbizonytalanságból származik. Az alapállapot energiája mindig nagyobb, mint a potenciális energia minimuma: $E_0 > U_{\min}$. Ennek az az oka, hogy a határozatlansági elv miatt, ha csökken a részecske Δx helybizonytalansága, azaz a részecske egyre nagyobb valószínűséggel az $x_{\min}$ minimushely közelébe kerül a potenciál vonzása miatt, akkor a részecske $\Delta p_x \geq \mathcal{O}(\hbar)/\Delta x$ impulzusbizonytalansága nagyon megnő és ezáltal a részecske kinetikus energiájának a várható értéke is megnő. Ha Δx csökken, akkor a potenciális energia $\overline{U(x)}$ várható értéke csökken, a kinetikus energia $\overline{T} = (\Delta p_x)^2/(2m)$ várható értéke pedig nő, úgyhogy az energia minimális értékéhez olyan „optimális” Δx tartozik, amely az $\overline{U(x)} + \overline{T}$ összeget minimalizálja.

- (b) Maradjunk továbbra is az előző pontban vizsgált „potenciálgödörben” történő mozgás példájánál, de most nézzük azt az esetet, amikor $U_- \leq E < U_+$. Ilyenkor egyetlen x_0 fordulópontja van a klasszikus mozgás pályának. Ez annak felel meg, hogy a részecske balról befut, majd a fordulópontban elveszíti sebességét és utána elindul visszafelé, balra elhagyva a kölcsönhatási tartományt. A klasszikus részecske nem hatol be a fordulópont mögötti $x > x_0$ tartományba. A stacionárius Schrödinger-egyenletnek az $U_- \leq E < U_+$ intervallumból vett minden E energiaértékhez tartozik megoldása, amelynek a hullámfüggvénye $x \rightarrow -\infty$ esetén egy befutó és egy visszavert anyaghullám szuperpozíciója. Az állapot szórási állapot. A hullámfüggvény behatol ugyan a klasszikus fordulópont mögötti $x > x_0$ tartományba, de nem jelenik meg áteresztett hullám. Végül az $E \geq U_+$ esetben nincsen fordulópontja a klasszikus mozgásnak, a részecske befut az $x \rightarrow -\infty$ (vagy az $x \rightarrow +\infty$) aszimptotikus tartományból és áthaladva a kölcsönhatási tartományon, elhagyja azt az $x \rightarrow +\infty$ ($x \rightarrow -\infty$) aszimptotikus tartomány irányában. Az időtől független Schrödinger-egyenletnek az $U_+ \leq E$ végtelen intervallumból vett minden E energiaértékhez tartozik megoldása. Ha pl. az $x \rightarrow -\infty$ tartományból befutó részecskét veszünk, akkor a stacionárius állapot hullámfüggvénye az $x \rightarrow -\infty$ aszimptotikus tartományban

totikus tartományban egy befutó és egy visszavert hullám szuperpozíciója, míg az $x \rightarrow +\infty$ aszimptotikusan távoli tartományban csak az áthaladó hullámot tartalmazza. A kvantumfizika megengedi, hogy a részecske ebben az esetben is valamilyen valószínűséggel visszaverődjön a kölcsönhatási tartományról.

- (c) A másik tipikus eset a véges „potenciálgát”. Ennek egyszerű példája olyan potenciál, amikor $U(x)$ tart nullához, ha $|x| \rightarrow \infty$, $U(x) \geq 0$ és $U(x)$ egyetlen szélsőértékkel, egy lokális maximummal rendelkezik az $x = x_{\max}$ helyen, amelynek értéke $U_{\max}$, $U(x)$ a $(-\infty, x_{\max}]$ és az $[x_{\max}, +\infty)$ intervallumban rendre szigorúan monoton növekvő, ill. csökkenő. Ha $0 \leq E \leq U_{\max}$, akkor a klasszikus mozgás aszerint, hogy a részecske balról, vagy jobbról fut be, egy-egy fordulóponttal rendelkezik a potenciálgát befutó részecske felőli oldalán, legyenek ezek rendre x_- és x_+ és $x_- < x_+$. Ilyenkor a klasszikus részecske sosem juthat be a „potenciálgát alatti” $[x_-, x_+]$ intervallumba. Szórási állapotok vannak: a klasszikus részecske balról (jobbról) befut, majd az x_- (x_+) fordulópontot elérve visszafordul és távozik abban az irányban, ahonnan befutott. Az időtől független Schrödinger-egyenletnek a $0 \leq E \leq U_{\max}$ intervallumból vett minden E energiaértékhez tartozik kétféle megoldása, amelyek egyike balról, másika jobbról befutó részecskének felel meg. A befutó oldalon az $|x| \rightarrow \infty$ aszimptotikusan távoli tartományban a stacionárius állapot hullámfüggvénye a befutó és a visszavert anyaghullám szuperpozíciója, ugyanakkor a hullámfüggvény a potenciálgát másik oldalán sem zérus, hanem az aszimptotikusan távoli tartományban kifutó hullám alakját ölti. Ez azt jelenti, hogy a potenciálgát $U_{\max}$ „magasságánál” kisebb E energiájú befutó részecske nem 1 valószínűséggel verődik vissza, hanem $\neq 0$ valószínűséggel megjelenik a potenciálgát másik oldalán, áthalad a potenciálgáton. Ezt a tisztán kvantumfizikai jelenséget nevezzük alagúteffektusnak. Következésképpen a stacionárius állapot hullámfüggvénye a klasszikus fordulópontok közti $[x_-, x_+]$ intervallumban sem nulla.

Ha a részecske energiája nem kisebb, mint a potenciálgát „magassága”, azaz $E \geq U_{\max}$, akkor a klasszikus mozgás pályájának nincsen fordulópontja; az $x \rightarrow -\infty$ ($x \rightarrow +\infty$) aszimptotikus tartományból befutó részecske a „potenciálgát felett” áthaladva távozik az $x \rightarrow +\infty$ ($x \rightarrow -\infty$) aszimptotikus tartomány irányába; visszaverődés nincsen. Az időtől független Schrödinger-egyenletnek minden $E \geq U_{\max}$ energiához tartozik egy balról és egy jobbról befutó részecskének megfeleltethető megoldása. A stacionárius állapot hullámfüggvénye a befutó oldalon az aszimptotikusan távoli tartományban a befutó és a visszavert anyaghullám szuperpozíciója, míg az átellenes oldalon

az aszimptotikusan távoli tartományban csak kifutó hullámot tartalmaz. A kvantumfizikai részecske tehát véges valószínűséggel visszaverődik a potenciálgátról akkor is, ha az energiája nagyobb, mint a potenciálgát „magassága”.

- Összegzésként elmondhatjuk, hogy egyetlen részecske külső potenciálmezőben történő egy-dimenziós mozgása esetén a kvantumeffektusok az alábbi változásokat okozzák a klasszikus mechanikai mozgáshoz képest.
 - Amíg a klasszikus mechanika szerint a részecske energiaspektruma folytonos, addig a kvantummechanikában a kötött állapotok energiája csak diszkrét értékeket vehet fel, míg a szórási állapotok energiaspektruma folytonos.
 - Ha az alapállapot kötött állapot, akkor annak energiája a határozatlansági elv következtében mindig határozottan nagyobb, mint a potenciális energia minimális értéke, s ennek oka a kvantumrészecske „nyüzsgése”.
 - A kvantummechanikai részecske alagúteffektus révén véges valószínűséggel át tud haladni olyan potenciálgáton, amelynek „magassága” nagyobb, mint az aszimptotikusan távoli befutó részecske energiája.
 - A kvantummechanikai részecske akkor is véges valószínűséggel visszaverődik a potenciálgátról, ha az energiája nagyobb, mint a potenciálgát „magassága”.

4.2.11. Részecske visszaverődése végtelen potenciálfalról

Ebben a fejezetben a végtelen potenciálfalba ütköző részecske problémáját tárgyaljuk. Ez a példa annyira „egyszerű”, hogy áteresztett hullám nem is jelenhet meg.

1. Stacionárius állapotokon alapuló tárgyalás

A legegyszerűbb az időtől független Schrödinger-egyenlet megoldásait felhasználni ahhoz, hogy megmutassuk, **a végtelen potenciálfalba ütköző m tömegű részecske a falról rugalmasan visszaverődik.** Vizsgáljuk a részecske visszaverődésének problémáját 1-dimenziós esetben, azaz mozogjon a részecske az x -tengely mentén olyan külső mezőben, amelyben a részecske potenciális energiája

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha } x < 0 \\ +\infty, & \text{ha } x > 0 \end{cases} \quad (4.2.176)$$

Tekintve, hogy az $x > 0$ félegyenes mentén a potenciális energia végtelen, azért a részecske nem tud oda behatolni, vagyis a hullámfüggvénye $\psi(x) = 0$, ha $x > 0$. Másrészről a hullámfüggvény folytonossága azt követeli meg, hogy a potenciális energia végtelen ugrásának helyén a hullámfüggvény bal oldali

határértéke is zérus legyen. Ha $x < 0$, akkor a részecske Hamilton-operátora megegyezik a szabad részecske Hamilton-operátorával, azaz $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m}$, ahol $\hat{p}_x$ a részecske (x -irányú) impulzusának operátora. Koordináta-reprezentációban az időtől független Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x), \quad x \in (-\infty, 0] \quad (4.2.177)$$

alakú, ahol $0 \leq E$ az energia-sajátérték. Ezt a közönséges másodrendű differenciálegyenletet kell megoldani megfelelő határfeltételekkel. Az egyik határfeltétel a hullámfüggvény folytonossága az $x = 0$ helyen:

$$\psi(0) = 0. \quad (4.2.178)$$

A másik határfeltétel az, hogy az $x \rightarrow -\infty$ határesetben a hullámfüggvény aszimptotikus alakja a balról beérkező részecskét leíró hullám és a potenciálfalról visszavert részecskét leíró hullám lineáris szuperpozíciója kell legyen. Ez a határfeltétel, most automatikusan kielégül, ha felírjuk a differenciálegyenlet megoldásának általános alakját. Vezessük be a

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0 \quad (4.2.179)$$

hullámszámot, amelynek segítségével az időtől független Schrödinger-egyenlet a

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0, \quad x \in (-\infty, 0] \quad (4.2.180)$$

alakot ölti. Ennek két lineárisan független megoldása van: e^{ikx} és e^{-ikx} , amelyek tetszőleges $k > 0$ valós paraméter esetén léteznek, és az

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (4.2.181)$$

energia-sajátértékhez tartoznak. Az differenciálegyenlet általános megoldása tehát a $(-\infty, 0]$ intervallumon

$$\psi(x) = A_+ e^{ikx} + A_- e^{-ikx}. \quad (4.2.182)$$

Képezzük az $E(k)$ energiájú stacionárius állapot időtől függő

$$\Psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E(k)t} \psi(x) = A_+ e^{-i(\omega t - kx)} + A_- e^{-i(\omega t + kx)} \quad (4.2.183)$$

hullámfüggvényét, ahol $\omega = \frac{E(k)}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$. Látjuk hogy az általános megoldás első és második tagja rendre jobbra haladó (azaz balról befutó) és balra haladó

(azaz visszavert) hullámot ír le. A hullámfüggvény folytonossága az $x = 0$ pontban az

$$A_+ + A_- = 0 \quad (4.2.184)$$

feltételt rója ki a befutó és a visszavert hullámok amplitúdóira. Mondhatjuk tehát, hogy

$$\psi(x) = \psi^{\text{be}}(x) + \psi^{\text{v}}(x), \quad x \in (-\infty, 0], \quad (4.2.185)$$

ahol $\psi^{\text{be}}(x) = A_+ e^{ikx}$ a befutó hullám és $\psi^{\text{v}}(x) = -A_+ e^{-ikx} = A_+ e^{-ikx - i\pi}$ a visszavert hullám. Az amplitúdó a visszaverődés során nem változik meg, de a visszavert hullám fázisa π -vel eltolódik a befutó hulláméhoz képest. A befutó hullám és a visszavert hullám rendre j_x^{be} és j_x^{v} valószínűségi áramot képvisel:

$$\begin{aligned} j_x^{\text{be}} &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^{\text{be}} \frac{d\psi^{\text{be}*}}{dx} - \psi^{\text{be}*} \frac{d\psi^{\text{be}}}{dx} \right) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} |A_+|^2 \left(-e^{ikx} i k e^{-ikx} - e^{-ikx} i k e^{ikx} \right) = \frac{\hbar k}{m} |A_+|^2, \end{aligned} \quad (4.2.186)$$

és az értelemszerű $k \rightarrow -k$ cserével kapjuk, hogy

$$j_x^{\text{v}} = -\frac{\hbar k}{m} |A_+|^2. \quad (4.2.187)$$

A részecske visszaverődésének valószínűsége

$$R = \frac{|j_x^{\text{v}}|}{|j_x^{\text{be}}|} = 1. \quad (4.2.188)$$

Ez összhangban van azzal, hogy a részecske nem hatol be a $[0, \infty)$ félegyenesre, ahol a potenciális energiája plusz végtelen lenne, hanem teljes egészében visszaverődik.

2. Visszaverődés végtelen potenciálfalról. Hullámcsomagokon alapuló tárgyalás

Kétségeink támadhatnak, hogy egy dinamikai feladatot stacionárius állapotok vizsgálata révén oldottunk meg. Erre több okunk is lehet:

- (a) A megoldást impulzus-sajátállapotok lineáris kombinációjaként raktuk össze, de sem ezek, sem a Schrödinger-egyenlet eredményül kapott megoldása nem véges normájú, azaz nem valódi fizikai állapot.
- (b) A bejövő és a visszavert valószínűségi áramsűrűséget úgy határoztuk meg, hogy a stacionárius állapot hullámfüggvényét fizikai szemléletünk alapján mintegy mesterségesen bontottuk két, egymással szembe haladó síkhullám szuperpozíciójára.

A 2. ellenvetés csak látszólagos. Egyrészt igaz, hogy a $(-\infty, 0]$ intervallumon a stacionárius állapot hullámfüggvénye

$$\psi(x) = A_+(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2A_+i \sin(kx), \quad (4.2.189)$$

és a hozzá tartozó valószínűségi áramsűrűség zérus,

$$\begin{aligned} j_x(x) &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \frac{d\psi^*}{dx} - \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} 4|A_+|^2 \left(k \sin(kx) \cos(kx) - k \sin(kx) \cos(kx) \right) = 0, \end{aligned} \quad (4.2.190)$$

másrészt viszont az is igaz, hogy

$$\begin{aligned} j_x(x) &= \frac{i\hbar}{2m} \left[\left(\psi^{\text{be}} + \psi^{\text{v}} \right) \left(\frac{d\psi^{\text{be}*}}{dx} + \frac{d\psi^{\text{v}*}}{dx} \right) - \text{c.c.} \right] \\ &= j_x^{\text{be}} + j_x^{\text{v}} + \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi^{\text{be}} \frac{d\psi^{\text{v}*}}{dx} + \psi^{\text{v}} \frac{d\psi^{\text{be}*}}{dx} - \text{c.c.} \right] \\ &= j_x^{\text{be}} + j_x^{\text{v}} + \frac{i\hbar}{2m} \left[ike^{ikx} e^{ikx} - ike^{-ikx} e^{-ikx} - \text{c.c.} \right] \\ &= j_x^{\text{be}} + j_x^{\text{v}}. \end{aligned} \quad (4.2.191)$$

A teljes valószínűségi áramsűrűség kifejezésében tehát a befutó és a visszavert hullámtól származó „kevert” járulékok kiejtik egymást. Ezért a felbontás a befutó és a visszavert hullám járulékeinak az összegére nem önkényes.

Az 1. ellenvetést úgy orvosolhatjuk, hogy nem az időtől független, hanem az időtől függő

$$i\hbar \partial_t \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) \quad (4.2.192)$$

Schrödinger-egyenletet oldjuk meg az $x \in (-\infty, 0]$ intervallumon megfelelő kezdőfeltétellel és azzal a határfeltétellel, hogy $\psi(x, = 0, t) = 0$ tetszőleges t időpillanatban. Ez az idő szerinti derivált tekintetében elsőrendű, az x koordináta szerinti derivált tekintetében másodrendű parciális differenciálegyenlet. Ezért a kezdeti feltétel az, hogy a $\Psi(x, t)$ hullámfüggvény a távoli múltban (a $t \rightarrow -\infty$ határesetben) az $x \rightarrow -\infty$ aszimptotikusan távoli tartományban nagyon jó közelítéssel egy *szabad* befutó részecske mozgását leíró $\phi^{\text{be}}(x, t)$ hullámcsomaggal arányos. Hasonlóképpen a $\Psi(x, t)$ hullámfüggvény sokkal később azután, hogy a részecske ütközött a potenciálfallal, azaz a távoli jövőben (a $t \rightarrow +\infty$ határesetben) nagyon jó közelítéssel egy *szabad* visszaverődött részecskét leíró $\phi^{\text{v}}(x, t)$ hullámcsomaggal arányos a távoli $x \rightarrow -\infty$ tartományban. Feltesszük, hogy $\phi^{\text{be}}(x, t)$ a $t = -T \rightarrow -\infty$ időpillanatban térben az

$x_0 = -(p_0/m)T < 0$ pont körül és az impulzustérben a $p_x = p_0 > 0$ impulzus körül lokalizált hullámcsomag. Az időtől függő (4.2.192) Schrödinger-egyenletet ezzel a kezdőfeltétellel megoldva azt vizsgáljuk, hogy ez a hullámcsomag időben hogyan fejlődik miközben kölcsönhat a potenciálfallal, majd azután újra eltávolodik a potenciálfaltól.

A 4.2.4 alfejezetben meghatároztuk a térben szabadon mozgó gaussi hullámcsomag alakját, mint az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldását azonosan eltűnő potenciál esetén. A (4.2.56), (4.2.58) és (4.2.59) egyenleteket egy-dimenziós esetre alkalmazzuk és helyettesítsünk be $t_0 = 0$ -t. Az így kapott hullámfüggvényt azonosítsuk a $\phi^{\text{be}}(x, t)$ befutó hullámcsomaggal:

$$\begin{aligned}\phi^{\text{be}}(x, t) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar t}} \mathcal{N}_{\text{be}} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{1}{4s^2} - \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2t}}} \exp \left[-\frac{m}{2\hbar t} \left(x - \frac{p_0}{m} t \right)^2 \frac{\frac{\hbar t}{2ms^2} + i}{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 s^4}} \right] \\ &= \mathcal{N}_{\text{be}} A(t) \exp \left[-\frac{m}{2\hbar t} \left(x - \frac{p_0}{m} t \right)^2 \frac{\frac{\hbar t}{2ms^2} + i}{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 s^4}} \right].\end{aligned}\quad (4.2.193)$$

Ez az azonosítás jogos, mert $t \rightarrow -\infty$ esetén a $|\phi^{\text{be}}(x, t)|^2$ valószínűségi sűrűségnek $x = \frac{p_0}{m}t \rightarrow -\infty$ helyen van a maximuma, és ez a maximum $\frac{p_0}{m}$ sebességgel halad a pozitív irányba az $x = 0$ hely felé közeledve. Természetesen az $x = 0$ -ban a $\psi(0, t) = 0$ határfeltételt kielégítő megoldásnak tartalmaznia kell a visszavert hullámot is. Utóbbit a befutó hullámcsomag képletéből $p_0 \rightarrow -p_0$ helyettesítéssel kapjuk meg,

$$\phi^{\text{v}}(x, t) = \mathcal{N}_{\text{v}} A(t) \exp \left[-\frac{m}{2\hbar t} \left(x + \frac{p_0}{m} t \right)^2 \frac{\frac{\hbar t}{2ms^2} + i}{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 s^4}} \right]. \quad (4.2.194)$$

Ezt a hullámfüggvényt joggal azonosítjuk a visszavert hullámcsomaggal, mert $t \rightarrow +\infty$ esetén maximuma az $x = -\frac{p_0}{m}t \rightarrow -\infty$ helyen van és $-\frac{p_0}{m}$ sebességgel halad a negatív x -tengely irányában. A (4.2.192) egyenlet megoldását tehát

$$\psi(x, t) = \phi^{\text{be}}(x, t) + \phi^{\text{v}}(x, t) \quad (4.2.195)$$

alakban keressük. A $\psi(0, t) = 0$ határfeltétel kielégül az $\mathcal{N}_{\text{v}} = -\mathcal{N}_{\text{be}}$ választással. A kapott megoldás „szemléletesen” azt jelenti, hogy amíg $-p_0 t/m \gg s$, vagyis a befutó hullámcsomag centruma jóval távolabb van a potenciálfaltól, mint a hullámcsomag szélessége, addig csak a befutó hullám ad lényeges járulékot a $\psi(x, t)$ megoldáshoz, mert a $\phi^{\text{v}}(x, t)$ komponens maximuma $x = -(p_0/m)t$ távoli helyen van az x -tengely pozitív részén. Amikor t tart nullához, akkor a befutó és a visszavert hullámcsomag maximuma (balról, ill. jobbról) az $x = 0$ helyhez tart és az amplitúdóik ellentétes előjele miatt kioltják egymást, majd ahogy t lényegesen nagyobbra nő, mint sm/p_0 , akkor az x -tengely negatív részén már csak a balra haladó visszavert hullámcsomagot látjuk.

A visszaverődés valószínűségének jellemzéséhez vizsgáljuk gondolatban a hullámcsomag áthaladását az $x = X = -(p_0/m)T$ helyen a $t = -T$ és a $t = +T$ időpillanatokban. Válasszuk T -t úgy, hogy $|X| \gg s$, azaz a megfigyelést a potenciálfaltól sokkal távolabb végezzük, mint a hullámcsomag félszélessége. Legyen ugyanakkor T sokkal kisebb, mint a hullámcsomag szétfolyását jellemző $\tau_c \sim \mathcal{O}(ms^2/\hbar)$ időtartam. Ebben az esetben elhanyagolhatjuk a hullámcsomag szétfolyását, és a befutó, ill. a visszavert hullámcsomagra az alábbi közelítéseket kapjuk:

$$\phi^{\text{be}}(x, t) \approx \mathcal{N}_{\text{be}} A(t) \exp \left[-\frac{1}{4s^2} \left(x - \frac{p_0}{m} t \right)^2 - \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2t} \left(x - \frac{p_0}{m} t \right)^2 \right] \quad (4.2.196)$$

$$\phi^{\text{v}}(x, t) \approx \mathcal{N}_{\text{v}} A(t) \exp \left[-\frac{1}{4s^2} \left(x + \frac{p_0}{m} t \right)^2 - \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2t} \left(x + \frac{p_0}{m} t \right)^2 \right] \quad (4.2.197)$$

Határozzuk meg a befutó és visszavert hullámcsomagok által létrehozott valószínűségi áramsűrűséget:

$$\begin{aligned} j_x^{\text{be}}(x, t) &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\phi^{\text{be}} \frac{\partial}{\partial x} \phi^{\text{be}*} - \text{c.c.} \right) \\ &\approx \frac{i\hbar}{2m} |\mathcal{N}_{\text{be}} A(t)|^2 2 \left(-\frac{1}{2s^2} + \frac{i}{\hbar} \frac{m}{t} \right) \left(x - \frac{p_0}{m} t \right) \exp \left[-\frac{1}{2s^2} \left(x - \frac{p_0}{m} t \right)^2 \right] \\ &= \left(\frac{1}{t} + \frac{i\hbar}{2ms^2} \right) \left(x - \frac{p_0}{m} t \right) \rho^{\text{be}}(x, t) \\ &= \left(\frac{1}{t} + \frac{i}{2\tau_c} \right) \left(x - \frac{p_0}{m} t \right) \rho^{\text{be}}(x, t) \approx \frac{1}{t} \left(x - \frac{p_0}{m} t \right) \rho^{\text{be}}(x, t), \quad (4.2.198) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} j_x^{\text{v}}(x, t) &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\phi^{\text{v}} \frac{\partial}{\partial x} \phi^{\text{v}*} - \text{c.c.} \right) \\ &\approx \left(\frac{1}{t} + \frac{i\hbar}{2ms^2} \right) \left(x + \frac{p_0}{m} t \right) \rho^{\text{v}}(x, t) \approx \frac{1}{t} \left(x + \frac{p_0}{m} t \right) \rho^{\text{v}}(x, t), \quad (4.2.199) \end{aligned}$$

ahol a megfelelő valószínűségi sűrűségek:

$$\rho^{\text{be}}(x, t) \approx |\mathcal{N}_{\text{be}} A(t)|^2 \exp \left[-\frac{1}{2s^2} \left(x - \frac{p_0}{m} t \right)^2 \right], \quad (4.2.200)$$

$$\rho^{\text{v}}(x, t) \approx |\mathcal{N}_{\text{v}} A(t)|^2 \exp \left[-\frac{1}{2s^2} \left(x + \frac{p_0}{m} t \right)^2 \right], \quad (4.2.201)$$

továbbá az $x = 0$ -ban előírt határfeltétel miatt $|\mathcal{N}_{\text{v}}|^2 = |\mathcal{N}_{\text{be}}|^2$. A valószínűségi áramsűrűségek képzetes részeit nyugodtan elhagyhatjuk, mert olyan t időpillanatokban vizsgálódunk, amikor $t \approx -T$, és $t \approx T$, azaz $|t| \gg \tau_c$.

Az R visszaverődési tényező értelmezésénél most körültekintőnek kell lennünk. Naívan a $|j_x^{\text{v}}(X, T)/j_x^{\text{be}}(X, -T)|$ hányadosra gondolhatnánk, ez azonban $0/0$

alakú nem jól definiált eredményre vezetne. Ezért a $x = X$ helyen a $t = T$ pillanat körüli τ hosszúságú időintervallumban áthaladó „valószínűségi töltést” hasonlítjuk össze az ugyanitt a $t = -T$ időpillanat körüli τ szélességű intervallumban áthaladó „töltéssel”:

$$R = \left| \frac{Q^v}{Q^{\text{be}}} \right|, \quad (4.2.202)$$

ahol a „valószínűségi töltések

$$Q^{\text{be}} = \int_{-T-\frac{\tau}{2}}^{-T+\frac{\tau}{2}} dt j_x^{\text{be}}(X, t), \quad (4.2.203)$$

$$Q^v = \int_{T-\frac{\tau}{2}}^{T+\frac{\tau}{2}} dt j_x^v(X, t). \quad (4.2.204)$$

A τ időintervallumot úgy választjuk, hogy $T \gg \tau \gg s/(p_0/m)$ legyen, vagyis sokkal rövidebb legyen, mint T , de elég hosszú legyen ahhoz, hogy a kb. s szélességű hullámcsomag τ idő alatt lényegében teljesen áthaladjon az X helyen. Azzal a közelítéssel éltünk, hogy az $A(t)$ amplitúdó változását elhanyagoltuk a $\tau \ll T$ időintervallum alatt.

$$\begin{aligned} Q^{\text{be}} &= \int_{-T-\frac{\tau}{2}}^{-T+\frac{\tau}{2}} dt j_x^{\text{be}}(X, t) \\ &\approx - \int_{-T-\frac{\tau}{2}}^{-T+\frac{\tau}{2}} dt \frac{1}{t} \frac{p_0}{m} (T+t) |\mathcal{N}A(-T)|^2 \exp \left[-\frac{p_0^2}{2m^2 s^2} (T+t)^2 \right] \\ &\approx -\frac{p_0}{m} |\mathcal{N}A(-T)|^2 \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \frac{t}{t-T} \exp \left[-\frac{p_0^2}{2m^2 s^2} t^2 \right] \\ &\approx \frac{p_0}{m} |\mathcal{N}A(-T)|^2 \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \frac{t}{T-t} e^{-\mu t^2}, \end{aligned} \quad (4.2.205)$$

ahol $\mu = \frac{p_0^2}{2m^2 s^2} \gg 1/\tau^2$. Mivel $|T-t| \ll T$, írhatjuk, hogy

$$\frac{t}{T-t} \approx \frac{1}{T} \frac{t}{1-(t/T)} \approx \frac{1}{T} \left(t + \frac{t^2}{T} + \dots \right), \quad (4.2.206)$$

amit felhasználva azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} Q^{\text{be}} &= \frac{p_0}{mT} |\mathcal{N}A(T)|^2 \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \left(t + \frac{t^2}{T} + \dots \right) e^{-\mu t^2} \approx \frac{p_0}{mT^2} |\mathcal{N}A(-T)|^2 \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt t^2 e^{-\mu t^2} \\ &= -\frac{p_0}{mT^2} |\mathcal{N}A(-T)|^2 \frac{\partial}{\partial \mu} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt e^{-\mu t^2}. \end{aligned} \quad (4.2.207)$$

Mivel azonban $\sqrt{1/\mu} \ll \tau$, a Gauss-integrál integrálási határait jó közelítéssel kitolhatjuk a végtelenbe:

$$\begin{aligned} Q^{\text{be}} &\approx -\frac{p_0}{mT^2} |\mathcal{N}A(-T)|^2 \frac{\partial}{\partial \mu} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} = \frac{\sqrt{\pi} p_0}{2mT^2 \mu^{3/2}} |\mathcal{N}A(-T)|^2 \\ &= \frac{\sqrt{\pi} p_0}{2mT^2} \frac{2\sqrt{2} m^3 s^3}{p_0^3} |\mathcal{N}A(-T)|^2 \end{aligned} \quad (4.2.208)$$

Hasonló közelítéseket használva határozzuk meg a visszavert „töltést”:

$$\begin{aligned}
Q^v &= \int_{T-\frac{\tau}{2}}^{T+\frac{\tau}{2}} dt j_x^v(X, t) \\
&= \int_{T-\frac{\tau}{2}}^{T+\frac{\tau}{2}} dt \frac{1}{t} \frac{p_0}{m} (t-T) |\mathcal{N}A(T)|^2 e^{-\mu(t-T)^2} \\
&= \frac{p_0}{m} |\mathcal{N}A(T)|^2 \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \frac{t}{t+T} e^{-\mu t^2} \\
&\approx \frac{p_0}{mT} |\mathcal{N}A(T)|^2 \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \left(t - \frac{t^2}{T} + \dots \right) e^{-\mu t^2} \\
&\approx \frac{p_0}{mT^2} |\mathcal{N}A(T)|^2 \frac{\partial}{\partial \mu} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt e^{-\mu t^2} \\
&\approx \frac{p_0}{mT^2} |\mathcal{N}A(T)|^2 \frac{\partial}{\partial \mu} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\mu t^2} \\
&= \frac{p_0}{mT^2} |\mathcal{N}A(T)|^2 \frac{\partial}{\partial \mu} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} = \frac{\sqrt{\pi} p_0}{2mT^2 \mu^{3/2}} |\mathcal{N}A(T)|^2 \\
&= \frac{\sqrt{\pi} p_0}{2mT^2} \frac{2\sqrt{2}m^3 s^3}{p_0^3} |\mathcal{N}A(T)|^2
\end{aligned} \tag{4.2.209}$$

A hullámcsomag szétfolyásának elhanyagolása miatt $|A(-T)|^2 = |A(T)|^2$, úgyhogy a reflexiós tényezőre $R = 1$ adódik, várakozásunknak megfelelően.

4.2.12. Alagúteffektus

A kvantummechanika helyességét többek között az is igazolja, hogy elmentmondásmentes magyarázatot ad az alagúteffektusra, amely a klasszikus fizika törvényei szerint lehetetlen lenne. Az alagúteffektus segítségével sikerült többek között megérteni a radioaktív atommagok alfa-bomlását, és az elektronok hideg emisszióját (az elektronok kilépését fémekből erős külső elektrosztatikus tér hatására).

Klasszikus pontrészcseke mozgása potenciálgát jelenlétében. Vizsgáljuk meg, **mi történik, ha a részecske mozgásának útjában potenciálgát helyezkedik el.** Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy a potenciál, $V(x) > 0$, az x_m helyen lokális maximummal rendelkező folytonos függvény, amely az aszimptotikusan távoli $x \rightarrow \pm\infty$ pontokban zérushoz tart, a $(-\infty, x_m]$ intervallumban szigorúan monoton növekvő, az $[x_m, +\infty)$ intervallumban szigorúan monoton csökkenő. Legyen V_0 a potenciál értéke a maximumban, $V(x_m) = V_0$, úgyhogy $0 \leq V(x) \leq V_0$. Miért beszélünk ekkor potenciálgatról? Az elnevezés a klasszikus mechanikából származik. Ha egy klasszikus pontrészcseke E energiával mozog a fenti potenciálban, akkor érvényes rá az energiamegmaradás törvénye:

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + V(x), \tag{4.2.210}$$

ahonnan a részecske impulzusa, mint a hely függvénye

$$p_x = \pm \sqrt{2m[E - V(x)]} \quad (4.2.211)$$

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 $0 < E < V_0$, akkor a részecske beleütközik a potenciálgátba és visszaverődik róla, akármelyik oldalról is indult. Induljon pl. balról, az $x \rightarrow -\infty$ tartományból a részecske, amelynek kezdetben teljes energiája kinetikus energia, akkor

$$p_x(x \rightarrow -\infty) = \sqrt{2mE}. \quad (4.2.212)$$

A részecske mozgása során kinetikus energiáját fokozatosan elveszti, mert az átalakul potenciális energiává. Végül eljut az $x_- < x_m$ pontba, ahol teljes kinetikus energiája potenciális energiává alakul,

$$E = V(x_-). \quad (4.2.213)$$

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 $x_+ > x_m$ 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. A részecske $R > 0$ valószínűséggel akkor is visszaverődik a potenciálgátról, ha az energiája nagyobb, mint a potenciális energia maximális értéke, tehát nem halad át rajta 1 valószínűséggel.
2. Ha a részecske energiája kisebb, mint a potenciális energia maximális értéke, $E < V_0$, akkor a részecske $T > 0$ valószínűséggel áthalad a potenciálgáton, és megjelenik annak a túloldalán. Ezt a jelenséget nevezik alagútjelenségnek.
3. Bármely $0 < E$ energiájú részecske esetében teljesül az

$$R + T = 1 \quad (4.2.214)$$

egyenlőség.

A (4.2.214) egyenlőséget a potenciálgát pontos alakjának ismerete nélkül is igazolhatjuk a valószínűségi sűrűségre vonatkozó kontinuitási egyenlet alapján.

Mivel az aszimptotikusan távoli $|x| \rightarrow \infty$ tartományokban a potenciál zérushoz tart, a részecske stacionárius állapotainak hullámfüggvénye ezekben a tartományokban úgy viselkedik, mint a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E \psi(x) \quad (4.2.215)$$

időtől független Schrödinger-egyenlet megoldása. Ezért az aszimptotikusan távoli $x \rightarrow \pm\infty$ tartományokban a befutó, a visszavert és az áteresztett részecskét is síkhullám írja le. Vegyük pl. a balról befutó részecskének megfelelő $\psi(x)$ stacionárius állapotot. Ekkor az $x \rightarrow -\infty$ tartományban $\psi(x)$ a befutó e^{ikx} és a visszavert e^{-ikx} hullámok szuperpozíciója kell legyen, míg az $x \rightarrow +\infty$ tartományban $\psi(x)$ csak a jobbra haladó e^{ikx} kifutó síkhullámot tartalmazhatja:

$$\psi(x) \stackrel{x \rightarrow -\infty}{\sim} \phi^{\text{be}}(x) + \phi^{\text{v}}(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad \psi(x) \stackrel{x \rightarrow +\infty}{\sim} \phi^{\text{t}} = F e^{ikx}, \quad (4.2.216)$$

ahol A , B és F rendre a befutó, visszavert és áteresztett hullám (komplex) amplitúdói, és $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. A megfelelő aszimptotikus tartományokban az összetevő síkhullámok az alábbi valószínűségi áramsűrűségeket hozzák létre:

$$j_x^{\text{be}} = \frac{k\hbar}{m} |A|^2, \quad j_x^{\text{v}} = -\frac{k\hbar}{m} |B|^2, \quad j_x^{\text{t}} = \frac{\hbar k}{m} |F|^2. \quad (4.2.217)$$

A teljes valószínűségi áramsűrűség $j_x(x) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi(x) \frac{d\psi^*(x)}{dx} - \text{c.c.} \right)$. Ha $x \rightarrow -\infty$, akkor $j_x(x) \sim j_x^{\text{be}} + j_x^{\text{v}}$, ha pedig $x \rightarrow +\infty$, akkor $j_x(x) \sim j_x^{\text{t}}$. A teljes valószínűségi áramsűrűség eleget tesz a

$$\frac{\partial \rho(x)}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial x} = 0 \quad (4.2.218)$$

kontinuitási egyenletnek. Stacionárius állapotok esetében a $\rho(x) = |\psi(x)|^2$ valószínűségi sűrűség idő szerinti első deriváltja zérus, úgyhogy a kontinuitási egyenlet a

$$\frac{\partial j_x}{\partial x} = 0 \quad (4.2.219)$$

alakot ölti, ahonnan következik, hogy j_x az x koordinátától sem függ. Válasszuk most az $x_1 < 0$ és az $x_2 > 0$ koordinátájú pontokat úgy, hogy azok az x_m maximumhelytől aszimptotikusan távoli pontokat jelöljenek, és integráljuk a kontinuitási egyenlet mindkét oldalát x szerint x_1 -től x_2 -ig:

$$\int_{x_1}^{x_2} dx \frac{\partial j_x}{\partial x} = j_x(x_2) - j_x(x_1) \quad (4.2.220)$$

$$\stackrel{x_1 \rightarrow -\infty, x_2 \rightarrow +\infty}{\sim} j_x^{\text{t}} - (j_x^{\text{be}} + j_x^{\text{v}}) = \frac{\hbar k}{m} \left(|F|^2 - (|A|^2 + |B|^2) \right) = 0,$$

ahonnan

$$|B|^2 + |F|^2 = |A|^2, \quad (4.2.221)$$

azaz

$$\frac{|B|^2}{|A|^2} + \frac{|F|^2}{|A|^2} = 1. \quad (4.2.222)$$

Ez valóban az $R + T = 1$ egyenlőség, mert

$$R = \left| \frac{\lim_{x \rightarrow -\infty} j_x^v(x)}{\lim_{x \rightarrow -\infty} j_x^{\text{be}}(x)} \right| = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \quad (4.2.223)$$

$$T = \left| \frac{\lim_{x \rightarrow +\infty} j_x^t(x)}{\lim_{x \rightarrow -\infty} j_x^{\text{be}}(x)} \right| = \frac{|F|^2}{|A|^2}. \quad (4.2.224)$$

Az alagúteffektusnak és a potenciálgát feletti energiájú részecske visszaverődésének jelenségét olyan leegyszerűsített modellen mutatjuk be, amikor a potenciálgát

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha } x < 0 \\ V_0 > 0, & \text{ha } 0 \leq x \leq b \\ 0, & \text{ha } x > b \end{cases} \quad (4.2.225)$$

és a részecske az $x \rightarrow -\infty$ tartományból fut be. A római számokkal az egyes intervallumokat jelöltük, amelyekben a potenciális energia állandó az x koordináta függvényében. Legyen a részecske kinetikus energiája $x \rightarrow -\infty$ esetén $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Keressük az időtől független

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (4.2.226)$$

Schrödinger-egyenlet megoldását. A megoldás alakja

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & \text{ha } x < 0 \\ Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}, & \text{ha } 0 \leq x \leq b, \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}, & \text{ha } b < x \end{cases} \quad (4.2.227)$$

ahol

$$\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \quad (4.2.228)$$

valós, ha $0 \leq E \leq V_0$, és tisztán képzetes, $\kappa = iK$, ha $E > V_0$. A 6 darab állandót úgy kell meghatározni, hogy a hullámfüggvény a potenciál véges szakadási helyein, azaz az $x = 0$ és az $x = b$ pontokban folytonos és folytonosan differenciálható legyen. A hullámfüggvényre és az első deriváltjára vonatkozó folytonossági feltételek az egyes tartományok határait jelentő $x = 0$ és $x = b$ pontokban:

$$A + B = C + D, \quad (4.2.229)$$

$$ik(A - B) = \kappa(C - D), \quad (4.2.230)$$

$$Ce^{\kappa b} + De^{-\kappa b} = Fe^{ikb} + Ge^{-ikb}, \quad (4.2.231)$$

$$\kappa(Ce^{\kappa b} - De^{-\kappa b}) = ik(Fe^{ikb} - Ge^{-ikb}). \quad (4.2.232)$$

Ez 4 darab egyenlet 6 darab ismeretlen együtthatóra. A peremérték-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 az $x \rightarrow -\infty$, ill. az $x \rightarrow +\infty$ esetén csak kifutó részecskét (áteresztett síkhullámot) látunk. Vegyük az utóbbi esetet, amikor tehát $G = 0$, úgyhogy 5 darab ismeretlen együttható marad. Elvben a különböző E és E' energiákhoz (k és k' hullámszámokhoz) tartozó hullámfüggvényekre, mint nem valódi fizikai állapotokra, általánosított, Dirac-deltás ortonormáltsági feltételt róhatunk ki, s így 5 egyenletünk lesz az 5 darab állandó meghatározására. Könnyen beláthatjuk azonban, hogy az R reflexió tényező és a T transzmisszió tényező meghatározásához nincsen szükség az „ortonormáltsági” feltételre. A potenciálgátról való visszaverődés R , ill. az azon való áthaladás T valószínűségét rendre úgy kapjuk meg, hogy a visszavert hullám j_x^R , ill. az áthaladó hullám j_x^T valószínűségi áramsűrűségét osztjuk a befutó hullám j_x^{be} valószínűségi áramsűrűségével és vesszük a hányadosok abszolút értékét:

$$R = \left| \frac{j_x^R}{j_x^{\text{be}}} \right|, \quad T = \left| \frac{j_x^T}{j_x^{\text{be}}} \right|. \quad (4.2.233)$$

A vizsgált potenciálgát esetén az egyes valószínűségi áramsűrűségek rendre:

$$\begin{aligned} j_x^{\text{be}} &= \frac{i\hbar}{2m} |A|^2 (e^{ikx} \frac{d}{dx} e^{-ikx} - e^{-ikx} \frac{d}{dx} e^{ikx}) = \frac{\hbar k}{m} |A|^2, \\ j_x^R &= -\frac{\hbar k}{m} |B|^2, \quad j_x^T = \frac{\hbar k}{m} |F|^2. \end{aligned} \quad (4.2.234)$$

Azt kapjuk tehát, hogy

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} \quad \text{és} \quad T = \frac{|F|^2}{|A|^2}. \quad (4.2.235)$$

A (4.2.229)-(4.2.232) határfeltételi egyenletek rendszere tekinthető úgy, mint az A , B , C , D együtthatókra vonatkozó olyan inhomogén lineáris egyenletrendszer, amelyben az inhomogenitási tagok mind arányosak az F együtthatóval, és amelynek megoldása ezért $A = \alpha(E)F$, $B = \beta(E)F$, $C = \gamma(E)F$, $D = \delta(E)F$ alakú kell legyen, ahol $\alpha(E)$, $\beta(E)$, $\gamma(E)$ és $\delta(E)$ a k és κ paraméterek révén csak az E energiától függő szorzótényezők. Ekkor $|F|^2$ nyilvánvalóan kiesik az R -et és T -t definiáló hányadosokból.

Az R és T tényezők kiszámítását az alábbi stratégiával végezzük:

- Oldjuk meg először a (4.2.231) és (4.2.232) egyenleteket C -re és D -re:

$$C = \frac{1}{2} e^{-\kappa b} \left(1 + \frac{ik}{\kappa} \right) F e^{ikb}, \quad (4.2.236)$$

$$D = \frac{1}{2} e^{\kappa b} \left(1 - \frac{ik}{\kappa} \right) F e^{ikb}. \quad (4.2.237)$$

- Oldjuk meg a (4.2.229) és (4.2.230) egyenleteket A -ra és B -re:

$$A = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\kappa}{ik} \right) C + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\kappa}{ik} \right) D, \quad (4.2.238)$$

$$B = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\kappa}{ik} \right) C + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\kappa}{ik} \right) D. \quad (4.2.239)$$

- Helyettesítsük be C és D (4.2.236) és (4.2.237) kifejezéseit az (4.2.238) és (4.2.239) egyenlőségek jobb oldalába:

$$\begin{aligned}
A &= \frac{1}{4} \left[\left(1 + \frac{\kappa}{ik}\right) \left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right) e^{-\kappa b} + \left(1 - \frac{\kappa}{ik}\right) \left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) e^{\kappa b} \right] F e^{ikb} \\
&= \frac{1}{4ik\kappa} \left[(\kappa + ik)^2 e^{-\kappa b} - (\kappa - ik)^2 e^{\kappa b} \right] F e^{ikb}, \tag{4.2.240}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B &= \frac{1}{4} \left[\left(1 - \frac{\kappa}{ik}\right) \left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right) e^{-\kappa b} + \left(1 + \frac{\kappa}{ik}\right) \left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) e^{\kappa b} \right] F e^{ikb} \\
&= \frac{1}{4ik\kappa} (\kappa + ik)(\kappa - ik)(e^{\kappa b} - e^{-\kappa b}) F e^{ikb} \\
&= \frac{1}{2ik\kappa} (\kappa + ik)(\kappa - ik) \text{sh}(\kappa b) F e^{ikb}. \tag{4.2.241}
\end{aligned}$$

A továbbiakban külön-külön diszkutáljuk azt az esetet, amikor a részecske E energiája kisebb, ill. nagyobb, mint a potenciálgát V_0 magassága.

1. Vizsgáljuk először a $0 < E < V_0$ esetet, és határozzuk meg az alagúteffektus T valószínűségét. Ebben az esetben κ valós. Képezzük a (4.2.240) és (4.2.241) kifejezések abszolút értékének négyzetét:

$$|A|^2 = \frac{|F|^2}{16k^2\kappa^2} \left| (\kappa + ik)^2 e^{-\kappa b} - (\kappa - ik)^2 e^{\kappa b} \right|^2, \tag{4.2.242}$$

$$|B|^2 = \frac{(\kappa^2 + k^2)^2 |F|^2}{4k^2\kappa^2} \text{sh}^2(\kappa b), \tag{4.2.243}$$

úgyhogy

$$R = \frac{|B|^2}{|AS|^2} = \frac{4(\kappa^2 + k^2)^2 \text{sh}^2(\kappa b)}{|(\kappa + ik)^2 e^{-\kappa b} - (\kappa - ik)^2 e^{\kappa b}|^2}, \tag{4.2.244}$$

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{16k^2\kappa^2}{|(\kappa + ik)^2 e^{-\kappa b} - (\kappa - ik)^2 e^{\kappa b}|^2}. \tag{4.2.245}$$

A továbbiakban még kiértékeljük az R és T tényezők közös nevezőjét.

$$\begin{aligned}
\text{nevező} &= \left| (\kappa^2 - k^2 + 2ik\kappa)e^{-\kappa b} - (\kappa^2 - k^2 - 2ik\kappa)e^{\kappa b} \right|^2 \\
&= \left| -(\kappa^2 - k^2)(e^{\kappa b} - e^{-\kappa b}) + 2ik\kappa(e^{\kappa b} + e^{-\kappa b}) \right|^2 \\
&= \left| -2(\kappa^2 - k^2)\text{sh}(\kappa b) + 4ik\kappa\text{ch}(\kappa b) \right|^2 \\
&= 16k^2\kappa^2\text{ch}^2(\kappa b) + 4(\kappa^2 - k^2)^2\text{sh}^2(\kappa b) \\
&= 16k^2\kappa^2 \left(1 + \text{sh}^2(\kappa b) \right) + 4(\kappa^2 - k^2)^2\text{sh}^2(\kappa b) \\
&= 16k^2\kappa^2 + [16k^2\kappa^2 + 4(\kappa^2 - k^2)^2]\text{sh}^2(\kappa b) \\
&= 16k^2\kappa^2 + 4(\kappa^2 + k^2)^2\text{sh}^2(\kappa b). \tag{4.2.246}
\end{aligned}$$

Vezessük még be a $\xi = V_0/E > 1$ hányadost, akkor $\kappa = k\sqrt{\xi - 1}$, és azt kapjuk, hogy

$$T = \frac{4(\xi - 1)}{4(\xi - 1) + \xi^2\text{sh}^2(k\sqrt{\xi - 1}b)}. \tag{4.2.247}$$

Éljünk azzal a feltevéssel, hogy $e^{\kappa b} \gg 1$. Ebben az esetben $\text{sh}(\kappa b) \approx e^{\kappa b}/2$, és a nevezőt a $\text{sh}^2(\kappa b)$ -vel arányos tag dominálja, úgyhogy jó közelítéssel

$$T \approx \frac{16(\xi - 1)}{\xi^2} e^{-2b\kappa} = T_0 \exp\left(-b\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\right) \tag{4.2.248}$$

adódik az alagúteffektus valószínűségére. Az alagúteffektus alapvetően exponenciálisan el van nyomva, ha széles a potenciálgát (b nagy); pontosabban, ha $b\kappa = b\sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \gg 1$.

2. Vizsgáljuk most meg azt az esetet, amikor $E > V_0$, és mutassuk meg, hogy ilyenkor is van visszaverődés a potenciálgátról. Ekkor $\kappa = iK$ tiszta képzetes és $K = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar > 0$. Ezt behelyettesítve a (4.2.240) és (4.2.241) egyenlőségek jobb oldalába azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}
A &= -\frac{1}{4kK} \left[-(K + k)^2 e^{-iKb} + (K - k)^2 e^{iKb} \right] F e^{ikb} \\
&= \frac{1}{4kK} \left[-(K^2 + k^2 - 2kK) e^{iKb} + (K^2 + k^2 + 2kK) e^{-iKb} \right] F e^{ikb} \\
&= \frac{1}{4kK} \left[-(K^2 + k^2)(e^{iKb} - e^{-iKb}) + 2kK(e^{iKb} + e^{-iKb}) \right] F e^{ikb} \\
&= \frac{1}{4kK} \left[4kK \cos(Kb) - 2i(K^2 + k^2) \sin(Kb) \right] F e^{ikb}, \tag{4.2.249}
\end{aligned}$$

$$B = \frac{(K^2 - k^2)\text{sh}(iKb)}{2kK} F e^{ikb}. \tag{4.2.250}$$

A keresett visszaverődési tényező tehát

$$\begin{aligned}
R &= \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(K^2 - k^2)^2 \sin^2(Kb)}{4k^2 K^2} \frac{16k^2 K^2}{16k^2 K^2 \cos^2(Kb) + 4(K^2 + k^2)^2 \sin^2(Kb)} \\
&= \frac{(K^2 - k^2)^2 \sin^2(Kb)}{4k^2 K^2 + [(K^2 + k^2)^2 - 4k^2 K^2] \sin^2(Kb)} \\
&= \frac{(K^2 - k^2)^2 \sin^2(Kb)}{(K^2 - k^2)^2 \sin^2(Kb) + 4k^2 K^2}.
\end{aligned} \tag{4.2.251}$$

Innen látjuk, hogy $0 < R < 1$, azaz van visszaverődés.

A potenciálgacon való áthaladás valószínűségére vonatkozó összefüggés tetszőleges alakú potenciálgaat esetén

$$T \approx T_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_-}^{x_+} dx \sqrt{2m[V(x) - E]} \right\}, \tag{4.2.252}$$

ahol az integrálás a klasszikus pálya fordulópontjai között történik⁵⁵. Ezen összefüggés alapján olyan fontos jelenségeket lehet értelmezni, mint pl. az atommagok alfa-bomlása és az elektronok kilépése fémből erős külső elektromos tér hatására (hideg emisszió). A (4.2.252) képlet a következőképpen is értelmezhető: osszuk fel az x_- és x_+ fordulópontok közti intervallumot infinitezimális $b = (x_+ - x_-)/N$ szélességű részintervallumokra és legyenek x_i ($i = 1, 2, \dots, N$) ezen részintervallumok tetszőleges belső pontjai; közelítsük a teljes potenciálgaat N darab egymáshoz szorosan illeszkedő, $V(x_i)$ magasságú, derékszögű potenciálgaat sorozatával; jelölje $T_i \propto \exp \left(-\frac{2b}{\hbar} \sqrt{2m[V(x_i) - E]} \right)$ az i -edik ilyen potenciálgacon történő áthaladás transzmissziós együtthatóját. A teljes potenciálgacon történő áthaladás transzmissziós együtthatója ekkor $T \propto \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^N T_i$, ahol a határátmenet a fordulópontok közti intervallum végtelenül finom felosztásának felel meg.

4.2.13. Lineáris harmonikus oszcillátor

1. A Hamilton-operátor és az időtől független Schrödinger-egyenlet

A lineáris harmonikus oszcillátort egy olyan, egy-dimenziós mozgást végző pontrészcseke valósítja meg, amelyik a

$$V(x) = \frac{1}{2} D x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \tag{4.2.253}$$

⁵⁵A transzmissziós együttható meghatározására a Wentzel-Kramers-Brillouin-féle közelítő módszer (röviden a WKB-közelítés) alkalmas.

Gregor Wentzel (1898-1978) német fizikus; Hendrik Anthony Kramers (1894-1952) holland fizikus, Léon Nicolas Brillouin (1889-1969) francia fizikus.

potenciálban⁵⁶ mozog, ahol $D = m\omega^2$ a visszatérítő erő (idegen szóval direkción erő), m a részecske tehetetlen tömege és ω a megfelelő klasszikus mozgás körfrekvenciája. Utóbbinak a kvantummechanikai jelentését majd később fogjuk látni. A lineáris harmonikus oszcillátor Hamilton-operátora tehát:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}D\hat{x}^2, \quad (4.2.254)$$

amely koordináta-reprezentációban

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}Dx^2 \quad (4.2.255)$$

alakot ölt. A lineáris harmonikus oszcillátor időtől független Schrödinger-egyenlete tehát:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}Dx^2\psi(x) = E\psi(x). \quad (4.2.256)$$

Vezessük be a $\lambda = m\omega/\hbar$ paramétert, akkor $-2mE/\hbar^2$ -tel történő szorzás után a Schrödinger-egyenlet

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \lambda^2 x^2 \psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) \quad (4.2.257)$$

alakot ölt. A továbbiak céljára érdemes áttérni az $y = \sqrt{\lambda}x$ új változóra. Legyen $\psi(x) \equiv F(y)$, akkor $\frac{d\psi}{dx} = \sqrt{\lambda} \frac{dF}{dy}$, $\frac{d^2\psi}{dx^2} = \lambda \frac{d^2F}{dy^2}$ adódik, és az (4.2.257) egyenlet

$$\frac{d^2F(y)}{dy^2} - y^2 F(y) = -\frac{2E}{\hbar\omega} F(y). \quad (4.2.258)$$

A Schrödinger-egyenlet olyan megoldásait keressük, amelyek normanégyzete 1-gyel egyenlő, $\|\psi\|^2 = 1$:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_{-\infty}^{\infty} dy |F(y)|^2. \quad (4.2.259)$$

A normálási feltételből, pontosabban a normálási integrál konvergenciájából az is következik, hogy $|F(y)|^2$ -nek $1/|y|$ -nél gyorsabban kell zérushoz tartania, ha $|y| \rightarrow \infty$, vagyis létezik olyan $K > 0$ pozitív állandó, hogy az $|y| \rightarrow \infty$ határesetben $|F(y)| < \frac{K}{\sqrt{|y|}}$.

A lineáris harmonikus oszcillátor stacionárius állapotainak hullámfüggvényeit és a megfelelő energia-sajátértékeket az alábbi lépésekben találjuk meg:

⁵⁶A kvantummechanikában szokás kicsit „pongyolán” fogalmazni és $V(x)$ -et potenciálnak nevezni, noha $V(x)$ tulajdonképpen potenciális energia.

- (a) Megsejtjük a stacionárius Schrödinger-egyenlet egy speciális megoldását, amelyről később belátjuk, hogy az alapállapotot írja le.
- (b) Léptető operátorokat értelmezünk, amelyek segítségével egy tetszőleges stacionárius állapotból megkapjuk az összes többi stacionárius állapotot, $\hbar\omega$ energia-adagonként csökkentve, ill. növelve a gerjesztési energiát.
- (c) Ezután belátjuk, hogy a lineáris harmonikus oszcillátornak van legkisebb energiájú állapota, és hogy ez azonos az első lépésben megsejtett megoldással.
- (d) Végül megkeressük a stacionárius állapotok hullámfüggvényeinek explicit alakját koordináta-reprezentációban.

Ha ezeket a lépéseket végrehajtjuk, akkor megtaláljuk a lineáris harmonikus oszcillátor összes stacionárius állapotát, amelyek hullámfüggvényei (1-re történt normálás után) ortonormált teljes rendszert alkotnak a lineáris harmonikus oszcillátor állapotainak Hilbert-terében. **Azt szoktuk mondani, hogy ezzel az eljárással megkonstruáljuk a lineáris harmonikus oszcillátor állapotainak Hilbert-terét**, hiszen a stacionárius állapotok (lineáris kombinációik révén) felfeszítik a teljes Hilbert-teret⁵⁷.

Menjünk most végig lépésről lépésre a fenti programon.

2. Speciális megoldás: az alapállapot hullámfüggvénye

Első megállapításunk az, hogy a lineáris harmonikus oszcillátor stacionárius Schrödinger-egyenletének van - többek között -

$$F_0(y) = C_0 e^{-\frac{1}{2}y^2}, \quad \text{azaz} \quad \psi_0(x) = C_0 e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2}, \quad C_0 = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/4} = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \quad (4.2.260)$$

alakú megoldása, ami az

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (4.2.261)$$

energia-sajátértékhez tartozik. Később be fogjuk látni, hogy a lineáris harmonikus oszcillátornak van legkisebb energiájú állapota, alapállapota és, hogy a (4.2.260) megoldás éppen az alapállapot hullámfüggvénye.

Csakugyan, ha a feltételezett megoldást behelyettesítjük a (4.2.257) Schrödinger-egyenletbe, azt kapjuk, hogy

$$-F_0 + y^2 F_0 - y^2 F_0 = -\frac{2E}{\hbar\omega} F_0, \quad (4.2.262)$$

⁵⁷Az első három pontban követett eljárás a gerjesztett állapotokat az alapállapotból állítja elő, miközben felhasználja a léptető operátorok algebrai tulajdonságait. Ezért ezt az eljárást **a Hilbert-ter algebrai megkonstruálásának** is nevezik. A 4. pontban egy másik lehetőséget is mutatunk a gerjesztett állapotok megkeresésére, amikor a stacionárius Schrödinger-egyenletnek az analízis módszereivel kapott megoldásait használjuk fel.

ami akkor és csak akkor teljesül, ha $E = E_0 - \frac{1}{2}\hbar\omega$. A C_0 együttható értékét (egy egységnyi abszolút értékű komplex fázisfaktor erejéig) az

$$1 = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_{-\infty}^{\infty} dy |F_0(y)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_{-\infty}^{\infty} dy |C_0|^2 e^{-y^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} |C_0|^2 \quad (4.2.263)$$

normálási feltételből határozhatjuk meg.

3. A keltő és eltüntető operátorok, és az energiakvantumok számának operátora

A többi energia-sajátértéket és a megfelelő energia-sajátállapotok hullámfüggvényeit a ψ_0 megoldásból kapjuk meg. Vezessük be az úgynevezett **keltő** és **eltüntető operátorokat** rendre az alábbi definíciókkal:

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\lambda} x - \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \frac{d}{dx} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y - \frac{d}{dy} \right), \quad (4.2.264)$$

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\lambda} x + \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \frac{d}{dx} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y + \frac{d}{dy} \right). \quad (4.2.265)$$

Az elnevezéseket később magyarázzuk meg. A keltő és eltüntető operátorok az alábbi tulajdonságokkal rendelkeznek:

- (a) Az $\hat{a}^+$ és az $\hat{a}$ operátorok az $L_2(\mathbb{R}, dy)$ Hilbert-tér fölött nem önadjungáltak, hanem egymásnak adjungáltjai:

$$(\hat{a}^+)^{\dagger} = \hat{a}, \quad \hat{a}^{\dagger} = \hat{a}^+. \quad (4.2.266)$$

Legyen $\psi(\xi) = F(y)$ és $\phi(\xi) = f(y)$ két tetszőleges, az $L_2(\mathbb{R}, dy)$ Hilbert-térből vett függvény, akkor

$$\begin{aligned} \langle \phi | (\hat{a}^+)^{\dagger} | \psi \rangle &= \langle \psi | \hat{a}^+ | \phi \rangle^* = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_{-\infty}^{\infty} dy F(y) \left(y - \frac{d}{dy} \right) f^*(y) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} dy F(y) y f^*(y) - \left[F(y) f^*(y) \right]_{-\infty}^{\infty} \right. \\ &\quad \left. + \int_{-\infty}^{\infty} dy f^*(y) \frac{d}{dy} F(y) \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} dy f^*(y) y F(y) + \int_{-\infty}^{\infty} dy f^*(y) \frac{d}{dy} F(y) \right) \\ &= \langle \phi | \hat{a} | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (4.2.267)$$

Ezt akartuk bizonyítani. Az utolsó egyenlőség felírásakor felhasználtuk a normanégyszet (a belső szorzat) konvergenciájából adódó határfeltételt.

A bizonyítást másképpen is elvégezhetjük. Mivel koordináta-reprezentációban az alábbi megfeleltetések érvényesek,

$$\hat{x} \longrightarrow x = \frac{y}{\sqrt{\lambda}}, \quad \hat{p}_x \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} = \sqrt{\lambda} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dy}, \quad (4.2.268)$$

az $\hat{a}^+$ és $\hat{a}$ operátorokat kifejezhetjük az $\hat{x}$ és $\hat{p}_x$ operátorokkal,

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\lambda} \hat{x} - \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x \right), \quad \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\lambda} \hat{x} + \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x \right). \quad (4.2.269)$$

Ezek a kifejezések ábrázolástól függetlenül érvényesek. Mivel $\hat{x}$ és $\hat{p}_x$ az $L_2(\mathbb{R}, dx)$ téren ható önadjungált operátorok, ezért rögtön adódik, hogy $\hat{a}$ és $\hat{a}^+$ egymás adjungáltjai. Későbbi felhasználás céljából érdemes felírni az inverz-relációkat:

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} (\hat{a} + \hat{a}^+), \quad \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \sqrt{\frac{2}{\lambda}} (\hat{a} - \hat{a}^+). \quad (4.2.270)$$

(b) Legyen

$$\hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a}. \quad (4.2.271)$$

Belátjuk, hogy (a) az $\hat{n}$ operátor önadjungált, (b) felcserélhető a $\hat{H}$ Hamilton-operátorral, $[\hat{n}, \hat{H}] = 0$, mert az utóbbi

$$\hat{H} = \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (4.2.272)$$

alakra hozható.

Képezzük $\hat{n}$ adjungáltját, akkor azt kapjuk, hogy

$$\hat{n}^\dagger = (\hat{a}^+ \hat{a})^\dagger = \hat{a}^\dagger (\hat{a}^+)^\dagger = \hat{a}^+ \hat{a} = \hat{n}, \quad (4.2.273)$$

vagyis $\hat{n}$ önadjungált.

Induljunk ki abból, hogy

$$\begin{aligned} \hat{n} &= \frac{1}{2} \left(y - \frac{d}{dy} \right) \left(y + \frac{d}{dy} \right) = \frac{1}{2} \left(y^2 - \frac{d}{dy} y + y \frac{d}{dy} - \frac{d^2}{dy^2} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(y^2 - 1 - y \frac{d}{dy} + y \frac{d}{dy} - \frac{d^2}{dy^2} \right) = \frac{1}{2} \left(\lambda x^2 - 1 - \frac{1}{\lambda} \frac{d^2}{dx^2} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{m\omega}{\hbar} x^2 - 1 - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d^2}{dx^2} \right). \end{aligned} \quad (4.2.274)$$

(Vigyázat, amikor a 3. egyenlőséget felírtuk, felhasználtuk, hogy az operátor-egyenlőségnek úgy van értelme, hogy a jobb oldalára odagondoljuk azt az $f(y)$ függvényt, amelyre az operátorok hatnak.) Szorozzuk a kapott egyenlőséget $\hbar\omega$ -val, akkor azt találjuk, hogy

$$\hbar\omega \hat{n} = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{2} \hbar\omega = \hat{H} - \frac{1}{2} \hbar\omega, \quad (4.2.275)$$

ahonnan a Hamilton-operátorra a keresett kifejezést kapjuk.

- (c) Az $\hat{n}$ operátor tehát önadjungált, úgyhogy a sajátértékei valósak. Kérdés, mit nyertünk azzal, hogy a Hamilton-operátort azonos átalakítással a (4.2.272) alakban kifejeztük az $\hat{n}$ operátorral? 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 az $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ energiasajátértékhez tartozó $\psi_0(x) = F_0(y)$ állapotból. A kérdéses kommutátorok:

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{1}, \quad (4.2.276)$$

$$[\hat{n}, \hat{a}] = -\hat{a}, \quad [\hat{n}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+. \quad (4.2.277)$$

A (4.2.276) reláció bizonyításához képezzük az

$$\begin{aligned} \hat{a}\hat{a}^+ &= \frac{1}{2}\left(y + \frac{d}{dy}\right)\left(y - \frac{d}{dy}\right) = \frac{1}{2}\left(y^2 + \frac{d}{dy}y - y\frac{d}{dy} - \frac{d^2}{dy^2}\right), \\ \hat{a}^+\hat{a} &= \frac{1}{2}\left(y - \frac{d}{dy}\right)\left(y + \frac{d}{dy}\right) = \frac{1}{2}\left(y^2 - \frac{d}{dy}y + y\frac{d}{dy} - \frac{d^2}{dy^2}\right) \end{aligned} \quad (4.2.278)$$

operátorszorzatokat, majd az utóbbit kivonva az előzőből megkapjuk a keresett azonosságot,

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \frac{d}{dy}y - y\frac{d}{dy} = 1 + y\frac{d}{dy} - y\frac{d}{dy} = 1. \quad (4.2.279)$$

A (4.2.276) azonosságot felhasználva könnyen beláthatjuk a (4.2.277) azonosságokat:

$$[\hat{n}, \hat{a}] = \hat{a}^+\hat{a}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^+\hat{a} = \hat{a}^+\hat{a}\hat{a} - (\hat{a}^+\hat{a} + 1)\hat{a} = -\hat{a}, \quad (4.2.280)$$

$$[\hat{n}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a} = \hat{a}^+(\hat{a}^+\hat{a} + 1) - \hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a} = \hat{a}^+. \quad (4.2.281)$$

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

$$\hat{n}\psi_\nu = \nu\psi_\nu. \quad (4.2.282)$$

A ν sajátérték valós, mert $\hat{n}$ önadjungált. A fenti csererelációk alapján könnyű észrevenni, hogy

$$\hat{n}(\hat{a}\psi_\nu) = (\nu - 1)(\hat{a}\psi_\nu), \quad \hat{n}(\hat{a}^+\psi_\nu) = (\nu + 1)(\hat{a}^+\psi_\nu). \quad (4.2.283)$$

Az $\hat{a}$ és az $\hat{a}^+$ operátorok tehát **léptető operátorok**, az $\hat{n}$ operátor sajátállapotára hatva, annak olyan újabb sajátállapotát állítják elő, amely rendre 1-gyel kisebb, ill. 1-gyel nagyobb sajátértékhez tartozik.

A (4.2.277) csererelációkat felhasználva írhatjuk, hogy

$$\hat{n}\hat{a}^+\psi_\nu = (\hat{a}^+\hat{n} + \hat{a}^+)\psi_\nu = (\nu + 1)\hat{a}^+\psi_\nu, \quad (4.2.284)$$

$$\hat{n}\hat{a}\psi_\nu = (\hat{a}\hat{n} - \hat{a})\psi_\nu = (\nu - 1)\hat{a}\psi_\nu. \quad (4.2.285)$$

- (e) Mivel bármely $\hat{a}\psi_\nu$ állapot normanégyzete nem negatív,

$$0 \leq \|\hat{a}\psi_\nu\|^2 = \langle \psi_\nu | \hat{a}^+ \hat{a} | \psi_\nu \rangle = \nu \langle \psi_\nu | \psi_\nu \rangle = \nu, \quad (4.2.286)$$

azért az $\hat{n}$ operátor valamennyi sajátértéke nem negatív.

Azonnal látjuk, hogy $\nu = 0$ a sajátértékek között van. Csakugyan, tudjuk egyrészt, hogy ψ_0 a Hamilton-operátornak $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ sajátértékhez tartozó sajátállapota. Másrészt az energia-sajátértékek az $\hat{n}$ -operátor sajátértékeivel kifejezve $E_\nu = \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ alakba írhatók. Innen látjuk, hogy $\nu = 0$ a sajátértékek között szerepel. Az E_0 sajátértékhez tartozó ψ_0 sajátállapotnak van még egy fontos tulajdonsága: belőle a „lefelé” léptető $\hat{a}$ operátorral nem lehet $\hat{H}$ és $\hat{n}$ újabb közös sajátállapotát képezni, mert

$$\hat{a}\psi_0 = 0. \quad (4.2.287)$$

Valóban fennáll, hogy

$$\hat{a}\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(y + \frac{d}{dy}\right)C_0e^{-\frac{1}{2}y^2} = C_0\frac{1}{\sqrt{2}}(y - y)e^{-\frac{1}{2}y^2} = 0. \quad (4.2.288)$$

4. A Hilbert-tér algebrai megszerkesztése

Ezután összeállíthatjuk az energia-sajátértékek és energia-sajátállapotok teljes összességét. Az $\hat{n}$ operátor ν sajátértékei a $\nu = n$ nem negatív egész számok. Az $n = 0, 1, 2, \dots$ kvantumszámok ebben a sorrendben növekvő energia-sajátértékeket határoznak meg az

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (4.2.289)$$

képlet szerint. Ez tisztán diszkrét energiaspektrum, amelyben $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ az alapállapot energiája, és az $n \geq 1$ értékekhez tartozó E_n energiaszintek a gerjesztett állapotok energiái. A szomszédos energiaszintek közötti energiakülönbség $\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$ a teljes spektrumban állandó, az energiaszintek ekvidisztánsan (egyenközűen) helyezkednek el. Az $\hat{a}^+$ és az $\hat{a}$ operátor a $\hbar\omega$ energiakvantumok számát rendre egyesével növeli, ill. csökkenti. Az $\hat{n}$ operátor $n = 0, 1, 2, \dots$ sajátértéke azt mutatja meg, hogy a ψ_n stacionárius állapotban a lineáris harmonikus oszcillátor hány darab $\hbar\omega$ energiakvantummal van gerjesztve. Ezért az $\hat{n}$ operátort a gerjesztési kvantumok számát meghatározó operátornak nevezik. A keltő és eltüntető operátor rendre az oszcillátor gerjesztett állapotában $\hbar\omega$ energiakvantumot „kelt” és a gerjesztett állapotból $\hbar\omega$ energiakvantumot „tüntet el”⁵⁸. Az alapállapotot az $\hat{a}\psi_0 = 0$ feltétel határozza meg. Az alapállapotból

⁵⁸Az elnevezés kicsit megtévesztő. Természetesen azt gondoljuk, hogy az oszcillátornak a $\hbar\omega$ energiakvantumot a környezetével történő kölcsönhatás során kell megkapnia vagy leadnia, úgyhogy valójában energiakvantum nem keletkezik és tűnik el, hanem azt a környezet adja át az oszcillátornak, vagy az oszcillátor a környezetnek. Ezt a kölcsönhatást a magára hagyott oszcillátor Schrödinger-egyenlete nyilvánvalóan nem veszi figyelembe.

kiindulva az $\hat{a}^+$ operátor ismételt alkalmazásával szerkeszthetjük meg a gerjesztett állapotokat a

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n \psi_0 \quad (4.2.290)$$

utasítással. Az $\frac{1}{\sqrt{n!}}$ szorzótényező biztosítja, hogy teljesüljön a $\|\psi_n\|^2 = 1$ normálási feltétel. Minden energiaszinthez pontosan 1 darab 1-re normált sajátállapot tartozik, vagyis minden sajátértékhez a Hilbert-tér egy egy-dimenziós altere tartozik. Az energiaszintek tehát nem elfajultak.

A ψ_n állapot normálási feltételét teljes indukcióval kaphatjuk meg. Abból indulunk ki, hogy $n = 0$ esetén $\|\psi_0\|^2 = 1$. Ezután feltesszük, hogy $n = k$ esetén teljesül, hogy a $\|\psi_k\|^2 = 1$ feltételt $\psi_k = (k!)^{-1/2}(\hat{a}^+)^k \psi_0$ kielégíti, és megmutatjuk, hogy akkor $\|\psi_{k+1}\|^2 = 1$ kielégítése $\psi_{k+1} = [(k+1)!]^{1/2}(\hat{a}^+)^{k+1} \psi_0$ alakban sikerül. A ψ_{k+1} állapotra vonatkozó normálási feltétel ekkor valóban teljesül, mert

$$\begin{aligned} \|\psi_{k+1}\|^2 &= [(k+1)!]^{-1} \langle \psi_0 | \hat{a}^{k+1} (\hat{a}^+)^{k+1} | \psi_0 \rangle = [(k+1)!]^{-1} \langle \psi_0 | \hat{a}^k \hat{a}^+ \hat{a} (\hat{a}^+)^k | \psi_0 \rangle \\ &= \frac{k!}{(k+1)!} \langle \psi_k | \hat{a} \hat{a}^+ | \psi_k \rangle = \frac{k!}{(k+1)!} \langle \psi_k | \hat{a}^+ \hat{a} + 1 | \psi_k \rangle \\ &= \frac{k!}{(k+1)!} (k+1) \|\psi_k\|^2 = 1. \end{aligned} \quad (4.2.291)$$

Kényelmes sokszor áttérni a „bra-ket” írásmódra. Ebben a stacionárius állapotok hullámfüggvénye $\psi_n(x) = \langle x | n \rangle$ alakba írható, ahol $|n\rangle$ az $\hat{n}$ operátor $n = 0, 1, 2, \dots$ sajátértékekhez tartozó sajátállapota: $\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$. Az alapállapot hullámfüggvénye $\psi_0(x) = \langle x | 0 \rangle$, ahol a $|0\rangle$ alapállapot eleget tesz az $\hat{a}|0\rangle = 0$ feltételnek⁵⁹. Az $1 = \langle n | n \rangle$ normálásnak eleget tevő állapotok

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n |0\rangle \quad (4.2.292)$$

alakúak. Ebből következik, hogy

$$\hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle. \quad (4.2.293)$$

Az $|n\rangle$ állapotok ortonormált teljes rendszert alkotnak, mert az önadjungált Hamilton-operátor 1-re normált sajátvektorai, és minden energiaszinthez csak egyetlen egy $|n\rangle$ sajátvektor tartozik. A normálási feltétel

$$\langle n | n' \rangle = \delta_{n,n'}. \quad (4.2.294)$$

A teljességi feltétel azt jelenti, hogy az oszcillátor tetszőleges $|\psi\rangle$ állapota kifejtethető az energia-sajátállapotok szerint,

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle, \quad (4.2.295)$$

⁵⁹Vigyázat! Most $|0\rangle$ az alapállapot és nem a Hilbert-tér nullvektora, amelyet most az egyenlőség jobb oldalán álló 0 képvisel.

ahol a kifejtési együtthatók

$$c_n = \langle n | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) \psi(x) \quad (4.2.296)$$

Ha visszaírjuk a kifejtési együtthatót az energia-sajátállapotok szerinti sorba, akkor leolvashatjuk, hogy az egység-operátor:

$$\hat{1} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|. \quad (4.2.297)$$

Valóban, írhatjuk, hogy

$$\hat{a}^+ |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^{n+1} |0\rangle = \frac{\sqrt{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}} (\hat{a}^+)^{n+1} |0\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad (4.2.298)$$

$$\begin{aligned} \hat{a} |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a} (\hat{a}^+)^n |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a} \hat{a}^+ (\hat{a}^+)^{n-1} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} (\hat{a}^+ \hat{a} + 1) |n-1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n}} (n-1+1) |n-1\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle. \end{aligned} \quad (4.2.299)$$

5. A kvantumoszillátor fizikai sajátosságai. 1.

Érdemes felfigyelni rá:

- (a) a klasszikus mechanika szerint a lineáris harmonikus oszcillátor az alapállapotban nem mozog, hanem a potenciál minimumhelyén (esetünkben az $x = 0$ helyen) nyugalomban van és energiája $E_0 = V(0) = 0$. A kvantált lineáris harmonikus oszcillátor energiája az alapállapotban nem nulla, hanem $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$. Azt szoktuk mondani, hogy **az alapállapotú oszcillátor sincs tökéletes nyugalomban, hanem zérusponti rezgéseket végez, amelyek energiája $\frac{1}{2} \hbar \omega$.**
- (b) A klasszikus mechanikában az oszcillátor kinetikus energiája a periódikus mozgást végző m tömegű részecske haladó mozgásából, a részecske nem nulla impulzusából származik. Feltehetjük a kérdést, hogy honnan származik a kvantált lineáris harmonikus oszcillátor kinetikus energiája stacionárius állapotban. Könnyen 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.

Elemi átalakításokkal kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{x} | n \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \langle n | \hat{a} + \hat{a}^+ | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \left(\sqrt{n} \langle n | n-1 \rangle + \sqrt{n+1} \langle n | n+1 \rangle \right) = 0, \\ \langle n | \hat{p}_x | n \rangle &= \frac{\hbar}{i} \sqrt{\frac{2}{\lambda}} \langle n | \hat{a} - \hat{a}^+ | n \rangle = \frac{\hbar}{i} \sqrt{\frac{2}{\lambda}} \left(\sqrt{n} \langle n | n-1 \rangle - \sqrt{n+1} \langle n | n+1 \rangle \right) = 0, \\ \langle n | \dot{\hat{x}} | n \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \langle n | [\hat{x}, \hat{H}] | n \rangle = -\frac{i}{\hbar} E_n \langle n | \hat{x} - \hat{x} | n \rangle = 0. \end{aligned} \quad (4.2.300)$$

A stacionárius állapotokban tehát a részecske kinetikus energiája nem haladó mozgásból származik. A kinetikus energia várható értéke:

$$\langle n | \frac{\hat{p}_x^2}{2m} | n \rangle = \langle n | \frac{\hat{p}_x^2 - \langle n | \hat{p}_x | n \rangle^2}{2m} | n \rangle \frac{(\Delta p_x)^2}{2m}. \quad (4.2.301)$$

Innen látjuk, hogy a kinetikus energia teljes egészében az impulzus szórásnégyzetéből származik. Ez biztosan nem tűnik el, mert a részecske hullámfüggvénye az $x = 0$ körüli véges intervallumban különbözik csak lényegesen zérustól, a végtelenben (ha $|x| \rightarrow \infty$) exponenciálisan lecseng, mint azt alább meg fogjuk mutatni. Ezért stacionárius állapotokban $(\Delta x)^2$ véges, és akkor a határozatlansági reláció következménye, hogy $(\Delta p_x)^2 > \mathcal{O}(\hbar/(\Delta x)^2)$ kell legyen. Azt szoktuk mondani, hogy az stacionárius állapotban a részecske „nyüzsgő”⁶⁰ noha nem végez haladó mozgást, és ebből a nyüzsgésből származik a kinetikus energiája.

- (c) Közvetlen számolással igazolható, hogy a stacionárius állapotokban teljesül a Heisenberg-féle határozatlansági reláció: a gerjesztett állapotokban, mint egyenlőtlenség, az alapállapotban, mint egyenlőség. Mi itt csak az utóbbit mutatjuk meg. A lineáris harmonikus oszcillátor alapállapotában a határozatlansági reláció telítésbe megy, azaz fennáll, hogy

$$(\Delta x)^2 (\Delta p_x)^2 = \frac{\hbar^2}{4}. \quad (4.2.302)$$

Az alapállapot hullámfüggvénye explicit alakjának felhasználásával írhatjuk, hogy

$$\begin{aligned} (\Delta x)^2 &= \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_{-\infty}^{\infty} dy C_0^2 e^{-y^2} \frac{y^2}{\lambda} = \frac{C_0^2}{\lambda^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} y^2 \\ &= -\frac{C_0^2}{\lambda^{3/2}} \frac{d}{d\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\alpha y^2} \Big|_{\alpha=1} = -\frac{C_0^2 \sqrt{\pi}}{\lambda^{3/2}} \frac{d}{d\alpha} \alpha^{-1/2} = \frac{C_0^2 \sqrt{\pi}}{2\lambda^{3/2}} \quad (4.2.303) \\ (\Delta p_x)^2 &= -\hbar^2 \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_{-\infty}^{\infty} dy C_0^2 e^{-\frac{1}{2}y^2} \lambda \frac{\partial^2}{\partial y^2} e^{-\frac{1}{2}y^2} \\ &= -\sqrt{\lambda} C_0^2 \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{2}y^2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} e^{-\frac{1}{2}y^2} \\ &= -\sqrt{\lambda} C_0^2 \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{2}y^2} \frac{d}{dy} \left(-y e^{-\frac{1}{2}y^2} \right) \\ &= -\sqrt{\lambda} C_0^2 \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} (-1 + y^2) \\ &= \sqrt{\lambda} C_0^2 \hbar^2 \left(\sqrt{\pi} - \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \right) = \frac{1}{2} \sqrt{\lambda \pi} C_0^2 \hbar^2. \quad (4.2.304) \end{aligned}$$

Ezekből következik, hogy

$$(\Delta p_x)^2 (\Delta x)^2 = \frac{\hbar^2 C_0^4 \pi}{4\lambda} = \frac{\hbar^2}{4}, \quad (4.2.305)$$

amit be akartunk látni.

⁶⁰A kifejezés Károlyházy Frigyes (eredetileg Fetter Frigyes, 1929-2012.) magyar fizikustól származik.

6. A stacionárius állapotok koordináta-hullámfüggvényei

Tanulságos, ha megkeressük a lineáris harmonikus oszcillátor stacionárius állapotainak $\psi_n(x) = \langle x|n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x|(\hat{a}^+)^n|0 \rangle = F_n(y)$ hullámfüggvényeit a koordináta-reprezentációban, ahol $y = \sqrt{\lambda}x$ és $\lambda = m\omega/\hbar$ korábbi jelöléseink szerint. Eljárhatnánk annak szellemében, hogy az alapállapot ismert hullámfüggvényére ismételtén hatnánk a koordináta-reprezentációban felírt $\hat{a}^+$ keltő operátorral. Most azonban mégsem ezt az utat követjük, hanem addig alakítjuk a lineáris harmonikus oszcillátor időtől független (4.2.258) Schrödinger-egyenletét, míg egy a matematikai szakirodalomból jól ismert egyenletet kapunk, amelynek ismertek a megoldásai. Válasszuk ezért le a tetszőleges $F(y)$ megoldásból az alapállapot hullámfüggvényét, mint szorzó tényezőt, és írjuk, hogy

$$F(y) = e^{-\frac{1}{2}y^2} f(y). \quad (4.2.306)$$

Ekkor azt találjuk, hogy

$$\begin{aligned} \frac{dF(y)}{dy} &= e^{-\frac{1}{2}y^2} \left(\frac{df(y)}{dy} - yf(y) \right), \\ \text{és} \quad \frac{d^2F(y)}{dy^2} &= e^{-\frac{1}{2}y^2} \left(\frac{d^2f(y)}{dy^2} - 2y \frac{df(y)}{dy} + (y^2 - 1)f(y) \right). \end{aligned} \quad (4.2.307)$$

Ezeket behelyettesítve a (4.2.258) egyenletbe az alábbi közönséges másodrendű differenciálegyenletet kapjuk a keresett $f(y)$ függvényre:

$$\frac{d^2f(y)}{dy^2} - 2y \frac{df(y)}{dy} + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1 \right) f(y) = 0. \quad (4.2.308)$$

Hasonlítsuk ezt össze az Hermite-polinomokat⁶¹ definiáló

$$\frac{d^2H(y)}{dy^2} - 2y \frac{dH(y)}{dy} + 2\nu H(y) = 0 \quad (4.2.309)$$

ismert differenciálegyenlettel, amelynek akkor és csak akkor van megoldása, ha $\nu = n = 0, 1, 2, \dots$ nem negatív egész szám. Az összehasonlítás alapján azt mondhatjuk, hogy a (4.2.308) egyenletnek csak olyan diszkrét E_n -kre van megoldása, amelyekre

$$\frac{2E_n}{\hbar\omega} - 1 = 2n, \quad (4.2.310)$$

azaz $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$. Ezzel visszakaptuk az energiaspektrumra vonatkozó korábbi eredményünket. A megoldások az $f_n(y) = \mathcal{N}_n H_n(y)$ úgynevezett

⁶¹Elnevezésüket Charles Hermite (1822-1901) francia matematikusról kapták.

Hermite-polinomok (az $\mathcal{N}_n$ normálási tényezőtől eltekintve). A lineáris harmonikus oszcillátor stacionárius állapotainak koordináta-hullámfüggvényei tehát

$$\psi_n(x) = F_n(y) = \mathcal{N}_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y) \quad (4.2.311)$$

alakúak.

További célunk az Hermite-polinomok explicit alakjának megkeresése. Ebben segít az a tény, hogy az Hermite-polinomok leszámaztathatók az

$$\mathcal{F}(y, s) = e^{y^2 - (s-y)^2} = e^{-s^2 + 2sy} \quad (4.2.312)$$

generáló függvényből. Nevezetesen megmutatjuk, hogy az $\mathcal{F}(y, s)$ generáló függvény s hatványai szerinti Taylor-sorának együtthatói éppen a (4.2.309) egyenlet $\nu = n = 0, 1, 2, \dots$ értékekhez tartozó megoldásai:

$$\mathcal{F}(y, s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(y) s^n, \quad (4.2.313)$$

ahonnan

$$\left. \frac{\partial^n \mathcal{F}(y, s)}{\partial s^n} \right|_{s=0} = H_n(y). \quad (4.2.314)$$

Jelöljük a (4.2.312) generáló függvény (4.2.313) Taylor-sorának egyelőre ismeretlen együtthatóit $H_n(y)$ -nal. Megmutatjuk, hogy ezek a $H_n(y)$ függvények az Hermite-polinomokat definiáló (4.2.309) egyenletnek a megoldásai, vagyis azonosak az Hermite-polinomokkal. Képezzük az $\mathcal{F}(y, s)$ generáló függvény első parciális deriváltjait:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial y} &= 2s e^{-s^2 + 2sy} = 2s \mathcal{F} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(y)}{n!} 2s^{n+1} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \frac{dH_n}{dy}, \end{aligned} \quad (4.2.315)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial s} &= (-2s + 2y) e^{-s^2 + 2sy} = (-2s + 2y) \mathcal{F} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(y)}{n!} (-2s + 2y) s^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^{n-1}}{(n-1)!} H_n(y). \end{aligned} \quad (4.2.316)$$

Az utolsó egyenlőségek két oldalán s azonos kitevőjű hatványai együtthatóinak egyenlőségéből rendre a következő azonosságokat kapjuk:

$$\frac{dH_n(y)}{dy} = 2n H_{n-1}(y), \quad (4.2.317)$$

$$H_{n+1}(y) = 2y H_n(y) - 2n H_{n-1}(y). \quad (4.2.318)$$

A (4.2.317) és (4.2.318) azonosságokból következik, hogy

$$\frac{dH_n(y)}{dy} = 2y H_n(y) - H_{n+1}(y). \quad (4.2.319)$$

Vegyük ennek az y szerinti első deriváltját, akkor a (4.2.317) azonosság újbóli felhasználásával kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}\frac{d^2 H_n(y)}{dy^2} &= 2H_n(y) + 2y \frac{dH_n(y)}{dy} - \frac{dH_{n+1}(y)}{dy} = 2H_n(y) + 2y \frac{dH_n(y)}{dy} - 2(n+1)H_n(y) \\ &= 2y \frac{dH_n(y)}{dy} - 2nH_n(y).\end{aligned}\quad (4.2.320)$$

Ha egy oldalra rendezzük a tagokat, akkor látjuk, hogy ez éppen az Hermite-polinomokat definiáló (4.2.309) egyenlet. A (4.2.313) Taylor-sor együtthatói tehát tényleg az Hermite-polinomok, és a (4.2.312) egyenlőséggel definiált $\mathcal{F}(y, s)$ függvény valóban az Hermite-polinomokat állítja elő a (4.2.314) utasítással.

Az Hermite-polinomok explicit alakjának előállítására alkalmas (4.2.314) összefüggést

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \quad (4.2.321)$$

alakra hozhatjuk.

A (4.2.312) definíciót felhasználva írhatjuk, hogy

$$H_n(y) = \left. \frac{\partial^n \mathcal{F}(y, s)}{\partial s^n} \right|_{s=0} = e^{y^2} \left. \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{-(s-y)^2} \right|_{s=0}. \quad (4.2.322)$$

Tetszőleges $f(s-y)$ függvény esetén fennáll, hogy $\frac{\partial f}{\partial s} = -\frac{\partial f}{\partial y}$, ezért azt kapjuk, hogy

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \left. \frac{\partial^n}{\partial y^n} e^{-(s-y)^2} \right|_{s=0} = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}. \quad (4.2.323)$$

Ezt akartuk belátni.

Konkrét példaként álljon itt néhány Hermite-polinom explicit alakban:

$$\begin{aligned}H_0(y) &= 1, & H_1(y) &= 2y, \\ H_2(y) &= 4y^2 - 2, & H_3(y) &= 8y^3 - 12y, \\ H_4(y) &= 16y^4 - 48y^2 + 12, & \dots\end{aligned}\quad (4.2.324)$$

Amit érdemes észben tartani, hogy $H_n(y)$ n -edrendű polinom, amelynek vezető rendű tagja $2^n y^n$; továbbá, hogy a páros, ill. páratlan indexű Hermite-polinomok rendre páros, ill. páratlan függvények.

Azt találtuk tehát, hogy a lineáris harmonikus oszcillátor stacionárius állapotainak koordináta-hullámfüggvényei:

$$\psi_n(x) = \mathcal{N}_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y) = \mathcal{N}_n e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} H_n(\sqrt{\lambda}x), \quad (4.2.325)$$

ahol $y = \sqrt{\lambda}x$ és $\lambda = m\omega/\hbar$, a normálási tényező pedig

$$|\mathcal{N}_n|^2 = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \frac{1}{2^n n!}. \quad (4.2.326)$$

A normálási tényezőt az

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_n(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_{-\infty}^{\infty} dy |\mathcal{N}_n|^2 e^{-y^2} H_n^2(y) \quad (4.2.327)$$

normálási feltételből határozhatjuk meg. Ennek jobb oldalán használjuk fel a (4.2.323) relációt,

$$1 = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} |\mathcal{N}_n|^2 (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} dy H_n(y) \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}, \quad (4.2.328)$$

majd integráljunk parciálisan,

$$1 = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} |\mathcal{N}_n|^2 (-1)^n \left\{ \left[H_n(y) \frac{d^{n-1}}{dy^{n-1}} e^{-y^2} \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{dH_n(y)}{dy} \frac{d^{n-1}}{dy^{n-1}} e^{-y^2} \right\}. \quad (4.2.329)$$

Itt a kapcsos zárójelben álló első tag a (4.2.323) reláció segítségével átírható az

$$\left[H_n(y) \frac{d^{n-1}}{dy^{n-1}} e^{-y^2} \right]_{-\infty}^{\infty} = \left[H_n(y) (-1)^{n-1} e^{-y^2} H_{n-1}(y) \right]_{-\infty}^{\infty} \quad (4.2.330)$$

alakba, amelyről látjuk, hogy eltűnik, mert az $|y| \rightarrow \infty$ határesetben $|y|^{2n-1} e^{-y^2} \rightarrow 0$. Azt kaptuk tehát egyszeri parciális integrálás után, hogy

$$1 = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} |\mathcal{N}_n|^2 (-1)^n (-1) \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{dH_n(y)}{dy} \frac{d^{n-1}}{dy^{n-1}} e^{-y^2}. \quad (4.2.331)$$

Hajtsunk végre egymás után $(n-1)$ -szer további parciális integrálásokat, akkor végül azt kapjuk, hogy

$$1 = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} |\mathcal{N}_n|^2 (-1)^n (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{d^n H_n(y)}{dy^n} e^{-y^2}. \quad (4.2.332)$$

Mivel $H_n(y)$ vezető rendű tagja $2^n y^n$, azért $\frac{d^n H_n(y)}{dy^n} = 2^n n!$, úgyhogy

$$1 = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} |\mathcal{N}_n|^2 2^n n! \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} |\mathcal{N}_n|^2 2^n n! \sqrt{\pi}, \quad (4.2.333)$$

ahonnan rendezés után megkapjuk a normálási együtthatóra vonatkozó (4.2.326) feltételt.

7. A kvantumoszcillátor fizikai sajátosságai. 2.

Az alap- és az első gerjesztett állapot hullámfüggvénye rendre:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{\lambda}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2}, \quad (4.2.334)$$

$$\psi_1(x) = \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} 2\sqrt{\lambda} x. \quad (4.2.335)$$

Látjuk, hogy ezeknek rendre 0 és 1 darab valós zérushelyük és rendre 1 és 2 valós szélsőérték-helyük van. Általában a $\psi_n(x)$ állapotban a hullámfüggvénynek n darab különböző valós zérushelye és $n+1$ darab különböző valós

szélsőérték-helye van. A stacionárius állapotok tehát kicsit hasonlítanak olyan állóhullámokhoz, amelyeknek n darab csomópontja van. További figyelemre méltó tény, hogy a páros és a páratlan n indexű állapotok $\psi_n(x)$ hullámfüggvénye rendre páros és páratlan függvény:

$$\psi_n(x) = \psi_n(-x), \text{ ha } n \text{ páros} \quad \text{és} \quad \psi_n(x) = -\psi_n(-x), \text{ ha } n \text{ páratlan.}$$

Ezért a koordináta-tengely $x \rightarrow -x$ tükrözésekor az n = páros indexű állapotok hullámfüggvénye változatlan marad, az n = páratlan indexűeké pedig előjelet vált. Azt mondjuk, hogy az n = páros indexű állapotok paritása pozitív, $\Pi = +$, az n = páratlan indexű állapotok paritása negatív, $\Pi = -$.

Érdekes még összehasonlítani a klasszikus és a kvantált oszcillátor mozgását. Az E energiájú klasszikus oszcillátor olyan A amplitudóval végez harmonikus rezgő mozgást, amelyre $E = \frac{1}{2}m\omega A^2$. A kvantumoszillátor $\psi_n(x)$ állapotában az E_n energiának a klasszikus mozgás $A_n = \sqrt{\frac{2E_n}{m\omega}}$ amplitudója felelne meg és klasszikusan a részecske csak az $|x| \leq A_n$ intervallumban tartózkodhatna. A kvantumoszillátor hullámfüggvényének azonban a „végtelenig elnyúló, lecsengő farka van”, vagyis a kvantumoszillátor ott is tartózkodhat nullától különböző valószínűséggel, ahol a klasszikus fizika szerint nem tartózkodhatna. Meg lehet azonban mutatni, hogy a $\psi_n(x)$ függvény szélsőérték-helyei és zérushelyei mind az $|x| \leq A_n$ intervallumon belül helyezkednek el. A részecske $|\psi_n(x)|^2 dx$ megtalálási valószínűsége az $[x, x + dx]$ intervallumban középértékben közelít a klasszikus $\rho_{kl}(x)dx$ találati valószínűséghez, ha $n \gg 1$, azaz magasan gerjesztett állapotokat tekintünk. Érdekes még megjegyezni, hogy az impulzus szórásnégyzete, $\langle n | \hat{p}_x^2 | n \rangle$ azért nem nulla, mert a hullámfüggvénynek szélsőérték-helyei vannak, és ezért az $d^2\psi_n(x)/dx^2$ nem nulla. Tulajdonképpen azt mondhatjuk, hogy a hullámfüggvény állóhullámokra emlékeztető alakjában van kódolva az oszcillátor-potenciálban mozgó m tömegű részecske „nyüzsgése”, azaz hogy a kinetikus energiája annak dacára nem nulla, hogy nem végez a részecske haladó mozgást.

4.2.14. Részecske mozgása centrális potenciálban

A Hamilton-operátor. 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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \quad (4.2.336)$$

alakú. Ha felhasználjuk a Δ Laplace-operátor korábban megtanult

$$\Delta = -\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi} \quad (4.2.337)$$

gömbi polárkoordinátás alakját és annak $\hat{\ell}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta, \varphi}$ kapcsolatát a részecske pályaimpulzusmomentumának operátorával, akkor az alábbi stacionárius Schrödinger-egyenletet kapjuk:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{\ell}^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi). \quad (4.2.338)$$

A *Hamilton-operátor önadjungáltságának feltétele*. A Hamilton-operátor első tagja, a kinetikus energia operátorának „radiális része”

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) = \frac{1}{2m} \hat{p}_r^2 \quad (4.2.339)$$

alakba írható, ha bevezetjük a $\hat{p}$ impulzus-operátor radiális irányú komponensét a Weyl-féle szimmetrizált alakban:

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2} \left(\frac{\vec{r}}{r} \cdot \hat{p} + \hat{p} \cdot \frac{\vec{r}}{r} \right). \quad (4.2.340)$$

Könnyen beláthatjuk, hogy koordináta-reprezentációban

$$\hat{p}_r = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r. \quad (4.2.341)$$

Csakugyan, legyen $R(r)$ tetszőleges, differenciálható függvény és legyen $\vec{A} = \frac{\vec{r}}{r} \cdot R$, amelynek gömbi polárkoordinátás komponensei $A_r = R$, $A_\theta = A_\varphi = 0$; segítségükkel írhatjuk, hogy

$$\begin{aligned} \hat{p}_r R &= \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \left[\frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{\nabla} R + \vec{\nabla} \left(\frac{\vec{r}}{r} R \right) \right] = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \left((\text{grad} R)_r + \text{div} \vec{A} \right) = \frac{\hbar}{2i} \left(\frac{dR}{dr} + \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 A_r) \right) \\ &= \frac{\hbar}{2i} \left(\frac{2}{r} R + 2 \frac{dR}{dr} \right) = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right) R. \end{aligned} \quad (4.2.342)$$

A $\hat{r}$ és a $\hat{p}_r$ operátorok kielégítik a Heisenberg-féle csererelációt,

$$[\hat{r}, \hat{p}_r] = \left[r, \frac{\hbar}{i} \left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right) \right] = i\hbar, \quad (4.2.343)$$

hiszen tetszőleges, differenciálható $R(r)$ függvény esetén igaz, hogy

$$\begin{aligned} \left[r, \frac{\hbar}{i} \left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right) \right] R(r) &= \frac{\hbar}{i} \left[r \left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right) R - \frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right] (rR) \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(R + r \frac{dR}{dr} - R - R - r \frac{dR}{dr} \right) = i\hbar R. \end{aligned} \quad (4.2.344)$$

Ha gömbi polárkoordináták használata esetén a hullámfüggvény normanégyszetének explicit alakja:

$$\|\psi\|^2 = \int_0^\infty dr \, r^2 \int_0^\pi d\theta \, \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi |\psi(r, \theta, \varphi)|^2. \quad (4.2.345)$$

Ebből következik, hogy ha $R(r)$ csak a radiális koordinátától függő hullámfüggvény, akkor normálgázete:

$$\|R\|^2 = \int_0^\infty dr r^2 |R(r)|^2, \quad (4.2.346)$$

illetve két tetszőleges $R(r)$ és $\bar{R}(r)$ radiális hullámfüggvény belső szorzata

$$\int_0^\infty dr r^2 \bar{R}^*(r) R(r). \quad (4.2.347)$$

Vegyük észre, hogy a $\hat{p}_r$ operátor és vele együtt a Δ -operátor radiális része a fenti belső szorzatra nézve azoknak és csak azoknak a radiális hullámfüggvényeknek a terén önadjungált, amelyek eleget tesznek az $rR(r) \rightarrow 0$, ha $r \rightarrow 0$ határfeltételnek. Ehhez azt kell megmutassuk, hogy

$$\left[\int_0^\infty dr r^2 R^* \frac{\hbar}{i} \left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right) \bar{R} \right]^* = \int_0^\infty dr r^2 \bar{R}^* \frac{\hbar}{i} \left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right) R. \quad (4.2.348)$$

Végezzük el a komplex konjugálást a bal oldalon, majd a részletesen kiírt kifejezés második tagjában hajtunk végre parciális integrálást:

$$\begin{aligned} \left[\int_0^\infty dr r^2 R^* \frac{\hbar}{i} \left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right) \bar{R} \right]^* &= -\frac{\hbar}{i} \int_0^\infty dr r^2 R \left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right) \bar{R}^* \\ &= -\frac{\hbar}{i} \left\{ \int_0^\infty dr r^2 R \frac{1}{r} \bar{R}^* + \int_0^\infty dr r^2 R \frac{\partial}{\partial r} \bar{R}^* \right\} \\ &= -\frac{\hbar}{i} \left\{ \int_0^\infty dr r^2 \bar{R}^* \frac{1}{r} R + \left[r^2 R \bar{R}^* \right]_0^\infty - \int_0^\infty dr \bar{R}^* \frac{\partial}{\partial r} (r^2 R) \right\} \\ &= -\frac{\hbar}{i} \left\{ \int_0^\infty dr r^2 \bar{R}^* \frac{1}{r} R + \left[r^2 R \bar{R}^* \right]_0^\infty - \int_0^\infty dr r^2 \bar{R}^* \left(\frac{2}{r} + \frac{\partial R}{\partial r} \right) \right\} \\ &= \int_0^\infty dr r^2 \bar{R}^* \frac{\hbar}{i} \left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right) R - \frac{\hbar}{i} \left[r^2 R \bar{R}^* \right]_0^\infty. \end{aligned} \quad (4.2.349)$$

A négyzetes integrálhatóság miatt $rR(r) \rightarrow 0$, ha $r \rightarrow \infty$. Ahhoz azonban, hogy az $r = 0$ pontban vett határfeltételi tag is eltűnjön, az szükséges, hogy az $rR(r) \rightarrow 0$ határfeltétel az origóban is teljesüljön, azaz ha $r \rightarrow 0$. Érdemes megjegyezni, hogy a ugyan $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r}$ operátor is kielégíti az $[r, -i\hbar \partial_r] = i\hbar$ csererelációt, de ez nem önadjungált operátor a négyzetesen integrálható függvények terén. A Hamilton-operátor önadjungáltsága tehát azáltal biztosítható, hogy olyan megoldásait keressük a Schrödinger-egyenletnek, amelyek az origóban eleget tesznek az $r\psi(r, \theta, \varphi) \rightarrow 0$ határfeltételnek, ha $r \rightarrow 0$.

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

$$[\hat{\ell}^2, \hat{H}] = 0, \quad [\hat{\ell}_z, \hat{H}] = 0. \quad (4.2.350)$$

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 pálya-impulzusmomentummal, ℓ kvantumszámmal is rendelkeznek és az adott energiájú állapotok mind a pálya-impulzusmomentum négyzetének ugyanahhoz az $\hbar^2 \ell(\ell+1)$ sajátértékéhez

tartoznak. Ugyanakkor 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 energia-sajátállapotok ezért $2\ell + 1$ -dimenziós alteret alkotnak. **Minden energiaszinthez $2\ell + 1$ darab lineárisan független állapot tartozik, amelyek csak ℓ_z sajátértékében különböznek. Ezért azt mondjuk, hogy a gömbszimmetria következtében minden energiához az állapotok egy multiplettje tartozik.** Ha $\ell = 0$ ill. $\ell = 1$, akkor speciálisan rendre 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

$$\psi_{E,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = R_{E,\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad (4.2.351)$$

alakban. Behelyettesítve a Schrödinger-egyenletbe nyilvánvalóvá válik, hogy az E energiájú állapot hullámfüggvénye általában attól is függhet, hogy mennyi ℓ értéke, hiszen a Hamilton-operátor az impulzusmomentum négyzetének operátorát is tartalmazza:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R_{E,\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = E R_{E,\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad (4.2.352)$$

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

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R_{E,\ell}(r) = E R_{E,\ell}(r). \quad (4.2.353)$$

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

$$R(r) = \frac{1}{r} \chi(r). \quad (4.2.354)$$

Helyettesítsük ezt be a radiális hullámegyenletbe és használjuk fel, hogy

$$\begin{aligned}\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \frac{\chi(r)}{r} \right) &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \left(\frac{1}{r} \frac{d\chi}{dr} - \frac{\chi}{r^2} \right) \right) \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{d\chi}{dr} - \chi \right) = \frac{1}{r^2} \left(\frac{d\chi}{dr} + r \frac{d^2\chi}{dr^2} - \frac{d\chi}{dr} \right) \\ &= \frac{1}{r} \frac{d^2\chi}{dr^2},\end{aligned}\tag{4.2.355}$$

akkor az alábbi egyenletet kapjuk:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi}{dr^2} + V_{eff}(r)\chi(r) = E\chi(r),\tag{4.2.356}$$

ahol bevezettük a

$$V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r)\tag{4.2.357}$$

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

$$\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2}\tag{4.2.358}$$

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. A kinetikus energia operátorának radiális része, ill. a radiális impulzuskomponens operátora akkor és csak akkor önadjungált, ha teljesül az origóban a $\chi(0) = 0$ határfeltétel. Ezért olyan megoldásokat fogunk keresni, amelyekre

$$\chi(0) = 0.\tag{4.2.359}$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} \chi = 0\tag{4.2.360}$$

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

$$a(a-1) = \ell(\ell+1) \quad (4.2.361)$$

adódik az ismeretlen a kitevőre. Az egyenletnek 2 megoldása van, $a = \ell + 1$ és $a = -\ell$. Az utóbbi megoldás azonban ℓ semmilyen értéke esetén nem tesz eleget az origóban kirótt határfeltételnek. **Ezért a határfeltételt is kielégítő egyetlen megoldás a potenciál centrumának közelében**

$$\chi(r) \sim r^{\ell+1}, \quad \Rightarrow \quad R(r) \sim r^\ell \quad (4.2.362)$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi_{asz}(r)}{dr^2} = -\epsilon \chi_{asz}(r) \quad (4.2.363)$$

alakot ölt. Átrendezve:

$$\frac{d^2 \chi_{asz}(r)}{dr^2} = \frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \chi_{asz}(r) \equiv \alpha^2 \chi_{asz}(r), \quad (4.2.364)$$

aminek a független megoldásai:

$$e^{-\alpha r}, \quad e^{\alpha r} \quad (4.2.365)$$

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 ($r \rightarrow \infty$)

$$\chi_{asz}(r) \sim e^{-\alpha r}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}} > 0 \quad (4.2.366)$$

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 egydimenziós stacionárius megoldásokra vonatkozó csomóponti tétel értelmében azt is jelenti, hogy az E_{n_r} energiaszinthez tartozó $\chi_{n_r, \ell}(r)$ hullámfüggvénynek a $(0, \infty)$ nyílt intervallumban n_r darab zérushelye van. Következésképpen az $R_{n_r, \ell}$ **radiális hullámfüggvénnyel leírt, álló gömbhullámnak n_r darab csomófelülete van, amelyek a potenciál centruma, mint origó körül elhelyezkedő koncentrikus gömbfelületek.**

4.2.15. Hidrogénatom

A hidrogén-atom és a klasszikus fizika. A hidrogén-atom (H-atom) olyan kötött rendszer, amelyben egy elektron helyezkedik el a pozitív töltésű atommag, a proton környezetében. A protonnak 3 nagyságrenddel nagyobb a nyugalmi tömege ($m_p c^2 = 1 \text{ GeV}$; $m_p = 1,7 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$), mint az elektronnak ($m_e c^2 = 511 \text{ keV}$; $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$). 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-potenciáalteret hoz létre. Ebben helyezkedik el az elektron, amelynek $-e = -1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ a töltése és így a potenciális energiája

$$-\alpha \frac{e^2}{r}, \quad (4.2.367)$$

ha r az elektron távolsága a protontól; α az egységrendszer megválasztásától függő állandó (a SI rendszerben $\alpha = (4\pi\epsilon_0)^{-1}$, ahol $\epsilon_0 \approx 8,9 \cdot 10^{-12} \text{ F/m}$ a vákuum permittivitása; $1 \text{ C} = 1 \text{ As}$ és $1 \text{ F} = 1 \text{ C/V} = 1 \text{ A}^2 \text{ s}^4 \text{ kg}^{-1} \text{ m}^{-2}$).

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

$$\alpha \frac{e^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r}, \quad (4.2.368)$$

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

$$-\alpha \frac{e^2}{r} + \frac{1}{2} m_e v^2 = E, \quad (4.2.369)$$

ahonnan

$$\frac{m_e v^2}{r} = 2 \left(\frac{E}{r} + \alpha \frac{e^2}{r^2} \right). \quad (4.2.370)$$

Ezt Newton II. törvényével összehasonlítva,

$$\alpha \frac{e^2}{r^2} = -\frac{2E}{r} \quad (4.2.371)$$

adódik, úgyhogy az $E < 0$ energiájú elektronnak

$$r = \alpha \frac{e^2}{-2E} \quad (4.2.372)$$

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.** Másodszor azért sem helyes a klasszikus modell, mert ez megengedné, hogy az elektron E energiája bármilyen negatív érték legyen. Ez egyúttal azt is jelentené, hogy tetszőleges energiát lehetne közölni, pl. elektromágnesesen az elektronnal, ill. hogy ugyanígy a gerjesztett H-atom tetszőleges energiát tudna leadni. Megvizsgálták ugyanakkor, hogy magas hőmérsékletű, H-atomokból álló gáz (hidrogén-lámpa) milyen elektromágneses sugárzást bocsát ki. Azt tapasztalták, hogy csak diszkrét frekvenciájú, azaz csak meghatározott diszkrét energia-adagoknak megfelelő sugárzást bocsát ki. Ebből arra kell következtetni, hogy **az elektronnak a H-atomban csak diszkrét energiájú kötött állapotai vannak, ezt a tapasztalati ténytet 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 klasszikus fizikával ellentétben a kvantummechanika magyarázatot ad arra, hogy az elektron miért nem esik be az atom középpontjában található protonba, és arra az eredményre vezet, hogy a kötött elektronállapotok csak diszkrét energiaértékeket vehetnek fel.

A centrális potenciálban elhelyezkedő pontrészcseke stacionárius állapotaira vonatkozó korábbi ismereteinket kell csak alkalmazni. Annnyiban kell óvatosan eljárunk, hogy a proton nincsen lerögzítve, ezért **a feladat valójában a protonból és az elektronnál álló 2-részecskés rendszer leírása.** Megmutatjuk, hogy ez a feladat hasonlóan vezethető vissza egy részecske centrális potenciálban történő mozgására, mint ahogy a klasszikus mechanikai kétfest-feladat is

viSSZavezethető egy-részecskés feladatra. A H-atom Hamilton-operátora:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_p}\Delta_{\vec{r}_p} - \frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_{\vec{r}_e} - \alpha\frac{e^2}{|\vec{r}_p - \vec{r}_e|}, \quad (4.2.373)$$

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:

$$\vec{R} = \frac{m_p\vec{r}_p + m_e\vec{r}_e}{m_p + m_e}, \quad \vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_p. \quad (4.2.374)$$

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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2(m_p + m_e)}\Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}} - \alpha\frac{e^2}{r}, \quad (4.2.375)$$

ahol

$$\mu = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} \quad (4.2.376)$$

a problémához tartozó **redukált tömeg**. Mivel a proton kb. 3 nagyságrenddel nagyobb tömegű, mint az elektron, $m_p/m_e \approx 1836$, azért a redukált tömeg jó közelítéssel az elektron tömegével egyenlő, és a proton közelítőleg a H-atom tömegközéppontjában helyezkedik el.

Felhasználtuk, hogy tetszőleges $\tilde{\psi}(\vec{r}_p, \vec{r}_e) \equiv \psi(\vec{R}, \vec{r})$ függvényre való hatásukban az alábbi operátor-azonosságok állnak fenn a Leibnitz-szabály értelmében:

$$\vec{\nabla}_{\vec{r}_p} = \frac{m_p}{m_p + m_e}\vec{\nabla}_{\vec{R}} - \vec{\nabla}_{\vec{r}}, \quad \vec{\nabla}_{\vec{r}_e} = \frac{m_e}{m_p + m_e}\vec{\nabla}_{\vec{R}} + \vec{\nabla}_{\vec{r}}. \quad (4.2.377)$$

Következésképpen a kinetikus energia operátorát az alábbi alakra hozhatjuk:

$$\begin{aligned} \hat{T} &= -\frac{\hbar^2}{2m_p}\Delta_{\vec{r}_p} - \frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_{\vec{r}_e} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_p}\left(\frac{m_p^2}{(m_p + m_e)^2}\Delta_{\vec{R}} + \Delta_{\vec{r}} - 2\frac{m_p}{m_p + m_e}\vec{\nabla}_{\vec{R}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}}\right) \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{m_e^2}{(m_p + m_e)^2}\Delta_{\vec{R}} + \Delta_{\vec{r}} + 2\frac{m_e}{m_p + m_e}\vec{\nabla}_{\vec{R}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}}\right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2(m_p + m_e)}\Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m_p} + \frac{1}{m_e}\right)\Delta_{\vec{r}} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2(m_p + m_e)}\Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}}. \end{aligned} \quad (4.2.378)$$

Mivel a Hamilton-operátorban szét tudtuk választani a tömegközépponti és a relatív helyzetvektortól való függést, a

$$\hat{H}\psi(\vec{R}, \vec{r}) = E_{atom}\psi(\vec{R}, \vec{r}) \quad (4.2.379)$$

stacionárius Schrödinger egyenlet megoldását a

$$\psi(\vec{R}, \vec{r}) = \Phi(\vec{R})\phi(\vec{r}) \quad (4.2.380)$$

szeparált alakban keressük. Ekkor

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2(m_p + m_e)} \Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} + V(r) \right) \Phi(\vec{R})\phi(\vec{r}) &= E_{\text{atom}} \Phi(\vec{R})\phi(\vec{r}), \\ -\frac{\hbar^2}{2(m_p + m_e)} \frac{\Delta_{\vec{R}}\Phi(\vec{R})}{\Phi(\vec{R})} + \frac{1}{\phi(\vec{r})} \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} + V(r) \right) \phi(\vec{r}) &= E_{\text{atom}}. \end{aligned} \quad (4.2.381)$$

Ez az egyenlet akkor és csak akkor állhat fenn, ha a bal oldalon álló két tag, amelyek egyike csak $\vec{R}$ -től, másika csak $\vec{r}$ -től függ, külön-külön állandó. Legyen E_{TKP} az első tag értéke, akkor

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_p + m_e)} \Delta_{\vec{R}}\Phi(\vec{R}) = E_{\text{TKP}}\Phi(\vec{R}), \quad (4.2.382)$$

ahol a $\Phi(\vec{R})$ hullámfüggvény a H-atom egészének, azaz a TKP-jának a szabad mozgását írja le. Mivel a TKP szabad mozgásának Hamilton-operátora felcserélhető a TKP impulzusának $\hat{\vec{P}} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{R}}$ operátorával, azért a közös sajátfüggvények a TKP impulzusának $\vec{P}$ sajátértékéhez tartozó síkhullám-megoldások:

$$\Phi(\vec{R}) = e^{i\vec{P} \cdot \vec{R}}, \quad (4.2.383)$$

és a megfelelő energia-sajátérték

$$E_{\text{TKP}} = \frac{\vec{P}^2}{2(m_p + m_e)}. \quad (4.2.384)$$

Ekkor az elektronnak az atommaghoz képesti relatív mozgását leíró $\phi(\vec{r})$ hullámfüggvényre, azaz a H-atomon belüli belső mozgásra vonatkozó hullámfüggvényre a

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} - \alpha \frac{e^2}{r} \right] \phi(\vec{r}) = E \phi(\vec{r}) \quad (4.2.385)$$

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

$$E_{\text{atom}} = \frac{\vec{P}^2}{2(m_p + m_e)} + E. \quad (4.2.386)$$

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

$$\hat{H}_{rel} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 \hat{\ell}^2}{2\mu r^2} - \alpha \frac{e^2}{r} \quad (4.2.387)$$

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

$$[\hat{H}_{rel}, \hat{\ell}^2] = 0, \quad [\hat{H}_{rel}, \hat{\ell}_z] = 0, \quad (4.2.388)$$

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

$$\phi_{E,\ell,m}(\vec{r}) = R_{E,\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad (4.2.389)$$

alakú, ahol $\hbar^2 \ell(\ell+1)$ és $\hbar m$ rendre az impulzusmomentum négyzetének és z -irányú vetületének a sajátértékei. Az $R_{E,\ell}$ radiális hullámfüggvényre vonatkozó hullám-egyenlet most

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - \alpha \frac{e^2}{r} \right] R(r) = E R(r). \quad (4.2.390)$$

(A jelölés egyszerűsítése érdekében átmenetileg elhagytuk a kvantumszámok feltüntetését a radiális hullámfüggvény alsó indexben.) Hozzuk az egyenletet

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \alpha \frac{e^2}{r} \right) R(r) = 0 \quad (4.2.391)$$

alakra. Vezessük be az atomfizikában széles körben használt Bohr-sugarat.

$$r_B = \frac{\hbar^2}{m_e \alpha e^2} \approx 0,5 \times 10^{-10} \text{ m} = 0,5 \text{ Å}. \quad (4.2.392)$$

Alább látni fogjuk, hogy ez a H-atom térbeli kiterjedésének nagyságrendjét meghatározó paraméter. Legyen továbbá

$$\tilde{R}(\tilde{r}) = \frac{R(r)}{r_B^2}, \quad \tilde{E} = \frac{m_e r_B^2}{\hbar^2} E. \quad (4.2.393)$$

Ekkor a radiális Schrödinger-egyenletet a következő alakra hozhatjuk:

$$\frac{1}{r_B^2} \left(\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R \right) + 2 \left(\frac{m_e}{\hbar^2} E + \frac{1}{r_B^2 r} \right) R = 0, \quad (4.2.394)$$

$$\frac{d^2 \tilde{R}}{d\tilde{r}^2} + \frac{2}{\tilde{r}} \frac{d\tilde{R}}{d\tilde{r}} - \frac{\ell(\ell+1)}{\tilde{r}^2} \tilde{R} + 2 \left(\tilde{E} + \frac{1}{\tilde{r}} \right) \tilde{R} = 0. \quad (4.2.395)$$

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

$$\frac{d^2 \tilde{R}^{(as)}(\tilde{r})}{d\tilde{r}^2} = -2\tilde{E} \tilde{R}^{(as)}(\tilde{r}) \quad (4.2.396)$$

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

$$\tilde{R}^{(as)}(\tilde{r}) \sim \exp\{\pm \sqrt{-2\tilde{E}} \tilde{r}\}. \quad (4.2.397)$$

Ha az energia negatív, azaz $\tilde{E} < 0$, 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 energia-sajátértékekhez tartozó stacionárius állapotok hullámfüggvényei tehát a H-atom TKP-jától távol exponenciálisan lecsengő állóhullámot írnak le. Az exponenciális lecsengés mértékét az energia-sajátérték határozza meg: minél kisebb $|\tilde{E}|$, azaz minél magasabban gerjesztett állapotról van szó, annál lassabban cseng le a hullámfüggvény az atom TKP-jától távolodva.

Ezzel szemben, ha az energia pozitív, azaz $\tilde{E} > 0$, 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, és azok a TKP felé közeledő, vagy attól távolodó hullámcsomagot fognak leírni. Az ilyen állapotú elektron a mozgás során nincsen a tér korlátos tartományára korlátozva. A kapott állapotok ún. szórési állapotok.

A jelen fejezetben a kötött állapotokkal foglalkozunk. Mivel az energia negatív, $\tilde{E} < 0$, vezessünk be további jelöléseket:

$$\nu = \frac{1}{\sqrt{-2\tilde{E}}}, \quad \rho = \frac{2\tilde{r}}{n}, \quad \mathcal{R}(\rho) = \tilde{R}(\tilde{r}); \quad (4.2.398)$$

innen kapjuk, hogy

$$\tilde{r} = \frac{\nu}{2}\rho, \quad \tilde{E} = -\frac{1}{2\nu^2} = -\frac{1}{4} \frac{1}{(\nu/2)^2}. \quad (4.2.399)$$

Az új jelölésekkel a radiális Schrödinger-egyenletet tovább alakíthatjuk:

$$\frac{1}{(\nu/2)^2} \left[\frac{d^2 \mathcal{R}}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d\mathcal{R}}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \mathcal{R} \right] + 2 \left(\tilde{E} + \frac{1}{(\nu/2)\rho} \right) \mathcal{R} = 0, \quad (4.2.400)$$

$$\frac{d^2 \mathcal{R}}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d\mathcal{R}}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \mathcal{R} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{\nu}{\rho} \right) \mathcal{R} = 0, \quad (4.2.401)$$

$$\frac{d^2 \mathcal{R}}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d\mathcal{R}}{d\rho} + \left(-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{\nu}{\rho} - \frac{1}{4} \right) \mathcal{R} = 0. \quad (4.2.402)$$

A megoldást úgy keressük, hogy **figyelembe vesszük a radiális hullámfüggvényre vonatkozó határfeltételeket az origóban és a végtelenben**. A hullámfüggvény korlátossága (pontosabban a Laplace-operátor radiális részének önadjungálttsága) az origóban az $\mathcal{R}_{\nu,\ell}(\rho) \sim \rho^\ell$ viselkedést követeli meg. A végtelenben a viselkedést úgy olvashatjuk le, hogy elhagyjuk az $1/\rho$ -val és $1/\rho^2$ -tel arányos tagokat:

$$\frac{d^2 \mathcal{R}(\rho)}{d\rho^2} - \frac{1}{4} \mathcal{R}(\rho) = 0, \quad (4.2.403)$$

ahonnan $\mathcal{R}(\rho) \sim e^{\pm \frac{1}{2}\rho}$, de ezek közül csak $\mathcal{R}(\rho) \sim e^{-\frac{1}{2}\rho}$ ad normálható hullámfüggvényt. Mindezeket figyelembe véve a megoldást

$$\mathcal{R}_{\nu,\ell}(\rho) = \rho^\ell e^{-\frac{1}{2}\rho} w_{\nu,\ell}(\rho) \quad (4.2.404)$$

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

$$\rho \frac{d^2 w(\rho)}{d\rho^2} + (2\ell + 2 - \rho) \frac{dw(\rho)}{d\rho} + (\nu - \ell - 1)w(\rho) = 0 \quad (4.2.405)$$

differentiálegyenletnek.

A (4.2.402) egyenletből indulunk ki. Ennek bal oldalán a radiális hullámfüggvény deriváltjai:

$$\frac{d\mathcal{R}}{d\rho} = \frac{\ell}{\rho} \mathcal{R} - \frac{1}{2} \mathcal{R} + \frac{1}{w} \frac{dw}{d\rho} \mathcal{R} = \left(\frac{\ell}{\rho} - \frac{1}{2} + \frac{1}{w} \frac{dw}{d\rho} \right) \mathcal{R}, \quad (4.2.406)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \mathcal{R}}{d\rho^2} &= \left(\frac{\ell}{\rho} - \frac{1}{2} + \frac{1}{w} \frac{dw}{d\rho} \right)^2 \mathcal{R} + \left[-\frac{\ell}{\rho^2} - \frac{1}{w^2} \left(\frac{dw}{d\rho} \right)^2 + \frac{1}{w} \frac{d^2 w}{d\rho^2} \right] \mathcal{R} \\ &= \left[\frac{\ell^2}{\rho^2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{w^2} \left(\frac{dw}{d\rho} \right)^2 - \frac{\ell}{\rho} + \frac{2\ell}{w\rho} \frac{dw}{d\rho} - \frac{1}{w} \frac{dw}{d\rho} - \frac{\ell}{\rho^2} - \frac{1}{w^2} \left(\frac{dw}{d\rho} \right)^2 + \frac{1}{w} \frac{d^2 w}{d\rho^2} \right] \mathcal{R} \\ &= \left[\frac{\ell^2}{\rho^2} + \frac{1}{4} - \frac{\ell}{\rho} + \frac{2\ell}{w\rho} \frac{dw}{d\rho} - \frac{1}{w} \frac{dw}{d\rho} - \frac{\ell}{\rho^2} + \frac{1}{w} \frac{d^2 w}{d\rho^2} \right] \mathcal{R}. \end{aligned} \quad (4.2.407)$$

Helyettesítsük be ezeket a (4.2.402) egyenletbe. Ekkor a következőket kapjuk:

$$0 = \frac{\ell^2}{\rho^2} + \frac{1}{4} - \frac{\ell}{\rho} + \frac{2\ell}{w\rho} \frac{dw}{d\rho} - \frac{1}{w} \frac{dw}{d\rho} - \frac{\ell}{\rho^2} + \frac{1}{w} \frac{d^2w}{d\rho^2} + \frac{2\ell}{\rho^2} - \frac{1}{\rho} + \frac{2}{w\rho} \frac{dw}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{\nu}{\rho} - \frac{1}{4}, \quad (4.2.408)$$

$$0 = \frac{1}{w} \frac{d^2w}{d\rho^2} + \left(\frac{2(\ell+1)}{w\rho} - \frac{1}{w} \right) \frac{dw}{d\rho} + \frac{\nu - \ell - 1}{\rho}. \quad (4.2.409)$$

Szorozzuk az utóbbi egyenlet mindkét oldalát $w\rho$ -val, akkor megkapjuk a (4.2.405) egyenletet.

A szóban forgó (4.2.405) differenciálegyenlet a felsőbb matematikában jól ismert

$$\rho \frac{d^2f}{d\rho^2} + (c - \rho) \frac{df}{d\rho} - af = 0 \quad (4.2.410)$$

alakú differenciálegyenlet, amelynek (az origóban nem szinguláris) megoldásai az

$$f(\rho) = F(a, c, \rho) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k}{(c)_k} \frac{\rho^k}{k!} \quad (4.2.411)$$

konfluens hipergeometrikus függvények, ahol $(a)_k = a(a+1) \cdots (a+k-1)$ és $(c)_k = c(c+1) \cdots (c+k-1)$. Feltéve, hogy $c \neq -n$, ahol $n = 0, 1, 2, \dots$ (azaz c nem azonos nullával vagy negatív egész számokkal), akkor a sor konvergens minden $\rho \in [0, \infty)$ esetén. A konfluens hipergeometrikus függvény $\rho \rightarrow \infty$ esetén akkor és csak akkor nem növekszik gyorsabban, mint ρ valamely véges hatványa, ha $a = -\bar{n} = 0, -1, -2, \dots$. Ha az is teljesül, hogy $c = m + 1$, ahol $m = 0, 1, 2, \dots$ (azaz c pozitív egész szám), akkor arányossági tényezőtől eltekintve a konfluens hipergeometrikus függvények azonosak az $L_{\bar{n}}^{(m)}(\rho)$ Laguerre-polinomokkal,

$$L_{\bar{n}}^{(m)}(\rho) = \frac{(\bar{n} + m)!}{\bar{n}!m!} F(-\bar{n}, m + 1, \rho) \quad (4.2.412)$$

amelyek $\bar{n}$ -edrendű polinomok.

Esetünkben $a = \ell + 1 - \nu$ és $c = 2\ell + 2$, úgyhogy a egész szám, ha $\nu = n$ egész szám és a keresett tulajdonságú, polinom alakú megoldásokat $a \leq 0$, azaz az

$$n - \ell - 1 \geq 0 \Rightarrow \ell \leq n - 1 \quad (4.2.413)$$

egyenlőtlenségek teljesülése esetén kapjuk meg az $m = 2\ell + 1$ felső indeksszel:

$$w_{n,\ell}(\rho) \propto L_{n_r}^{(2\ell+1)}(\rho); \quad (4.2.414)$$

ezek $n_r = n - \ell - 1$ -edrendű Laguerre-polinomok. A H-atomban az (n, ℓ, m) kvantumszámokkal jellemzett stacionárius állapotú elektron radiális hullámfüggvénye tehát csak az (n, ℓ) kvantumszámoktól függ és

$$R_{n,\ell}(r) = r_B^2 \tilde{R}_{n,\ell}(r/r_B) = \mathcal{N} r_B^2 \rho^\ell e^{-\rho/2} L_{n_r}^{(2\ell+1)}(\rho) \quad (4.2.415)$$

alakú, ahol $\rho = \frac{2r}{nr_B}$, és az $\mathcal{N}$ normálási együttható értékét a

$$1 = \int_0^\infty r^2 dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta R_{n,\ell}^2(r) |Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)|^2 = \int_0^\infty r^2 dr R_{n,\ell}^2(r) \quad (4.2.416)$$

normálási feltételből kell meghatározni.

**Az energiasajátértékeket az $n = 1, 2, \dots$ ún. főkvantumszám sor-
számozza növekvő sorrendben:**

$$\tilde{E} = -\frac{1}{2n^2}, \quad \text{ill.} \quad E = -\frac{\mu\alpha^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} \approx \frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}. \quad (4.2.417)$$

Az $\tilde{E} = -\frac{1}{2}$ energiájú alapállapot és az $\tilde{E} = 0$ energiaszint között végtelen sok energiaszintet találunk, amelyek mind kötött állapotokhoz tartoznak, és amelyek egyre sűrűbben helyezkednek el az energiatengelyen az energia növekedtével. Az energiasajátérték nem függ a pályamomentum négyzetének sajátértékétől, azaz ℓ -től, amit mellékkvantumszámnak nevezünk. Mivel a stacionárius megoldások teljesítik az $n - 1 \geq \ell$, ezért az egyes energiaszintek csak a mellékkvantumszám véges sok értéke,

$$\ell = 0, 1, \dots, n - 1 \quad (4.2.418)$$

mellett valósulhatnak meg:

Főkvantumszám	Lehetséges állapotok
$n = 1$	s
$n = 2$	s,p
$n = 3$	s,p,d
$\vdots$	

Mivel minden ℓ esetén a pályamomentum z -irányú vetületének a $\hbar m$ sajátértéke $2\ell + 1$ értéket vehet fel, ezért egy energiaszint elfajultsága:

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2. \quad (4.2.419)$$

Az m kvantumszámot mágneses kvantumszámnak nevezik, mert – mint alább majd kitérünk rá – az értéke kapcsolatos az atom mágneses dipólusmomentumával. 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 $n_r = n - \ell - 1$ darab 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. Annak a valószínűsége, hogy az elektront az (n, ℓ, m) stacionárius állapotban az r és $r + dr$ sugarú gömbfelületek közötti gömbhéjban találjuk

$$\begin{aligned}
w_{n,\ell}(r)r^2dr &\sim \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta |\phi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr = R_{n,\ell}^2(r)r^2dr \\
&= r_B^7 \tilde{R}_{n,\ell}^2(\tilde{r})\tilde{r}^2 d\tilde{r} \\
&= \left(\frac{n}{2}\right)^3 r_B^7 \mathcal{R}_{n,\ell}^2(\rho)\rho^2 d\rho \\
&= \left(\frac{n}{2}\right)^3 r_B^7 \mathcal{N}^2 \rho^{2\ell} e^{-\rho} \left[L_{n+\ell}^{(2\ell+1)}(\rho) \right]^2 \rho^2 d\rho,
\end{aligned} \tag{4.2.420}$$

ahol $\rho = (2/n)(r/r_B)$. Látjuk, hogy a találati valószínűség radiális irányban nagy $r \rightarrow \infty$ távolságokon exponenciálisan lecseng, a lecsengés karakterisztikus távolsága nr_B , növekvő főkvantumszámmal a lecsengés egyre lassabb. Ez azt jelenti, hogy a protont körülvevő elektronfelhő annál kiterjedtebb, minél magasabban gerjesztett kötött állapotról van szó. 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	$r_B^{7/2} \tilde{R}_{n,\ell}(\tilde{r})$	$\bar{r}$	$\overline{r^2}$	$w_{n,\ell}r^2 \propto$
1, 0	$2e^{-\tilde{r}}$	$\frac{3}{2}r_B$	$3r_B^2$	$\tilde{r}^2 e^{-2\tilde{r}}$
2, 0	$\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{1}{2}\tilde{r}}\left(1 - \frac{1}{2}\tilde{r}\right)$	$6r_B$	$42r_B^2$	$\tilde{r}^2\left(1 - \frac{1}{2}\tilde{r}\right)^2 e^{-\tilde{r}}$
2, 1	$\frac{1}{2\sqrt{6}}e^{-\frac{1}{2}\tilde{r}}\tilde{r}$	$5r_B$	$30r_B^2$	$\tilde{r}^4 e^{-\tilde{r}}$

Itt $\bar{r}$ és $\overline{r^2}$ definíciója a várható érték általános definíciója értelmében rendre

$$\bar{r} = \langle n, \ell | \hat{r} | n, \ell \rangle = \int_0^\infty dr r^3 R_{n,\ell}^2(r), \quad (4.2.421)$$

$$\overline{r^2} = \langle n, \ell | \hat{r}^2 | n, \ell \rangle = \int_0^\infty dr r^4 R_{n,\ell}^2(r). \quad (4.2.422)$$

Látjuk, hogy a Bohr-sugár nagyságrendileg egyenlő az alapállapotban az elektronnak a protontól mért átlagos távolságával. Az utolsó oszlopban feltüntettük annak a $w_{n,\ell} r^2$ valószínűségi sűrűségét (konstans szorzótól eltekintve), hogy az elektron az $(r, r + dr)$ infinitezimális intervallummal meghatározott gömbhéjban tartózkodik. Látjuk, hogy az origóban (a H-atom TKP-jában) a találati valószínűség eltűnik és az origótól nagy távolságban exponenciálisan lecseng. Az $1s$ és a $2p$ állapot esetében a hullámfüggvénynek nincsen csomófelülete az $r \in (0, \infty)$ nyílt intervallumban, a $2s$ állapot esetében pedig $2 - 0 - 1 = 1$ darab csomófelület van, amelynek sugara $r = 2r_B$.

A H-atom alapállapotának leírása. Az $(n = 1, \ell = m = 0)$ alapállapotban az elektron impulzusmomentuma zérus. Ez felfogható úgy is, mint annak a következménye, hogy **a H-atom alapállapotában az elektron valószínűségi áram-sűrűsége zérus:**

$$\vec{j} = \frac{\hbar i}{2\mu} (\psi_{100} \vec{\nabla} \psi_{100}^* - \psi_{100}^* \vec{\nabla} \psi_{100}) = 0, \quad (4.2.423)$$

ami nullának adódik, mert az alapállapot hullámfüggvénye,

$$\psi_{100} = R_{1,0}(r) Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{1,0}(r) \quad (4.2.424)$$

valós⁶².

A H-atom alapállapota s -állapot, ezért gömbszimmetrikus. A hullámfüggvény nem függ a θ és φ szögektől. **Az alapállapotú H-atomban nem folyik sem valószínűségi áram, sem töltésáram.** Az utóbbi a valószínűségi áramnak és az elektron $-e$ töltésének ($e > 0$) a szorzata. Az elektron töltéssűrűsége a H-atomban $\rho_e = -e |\psi_{100}(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t}|^2 = -e R_{1,0}^2(r)$ nem függ az időtől, sztatikus, a töltésáram sűrűsége pedig zérus. **A H-atom alapállapotában az elektron tehát csak sztatikus elektromos mezőt hoz létre, az alapállapotú H-atom stabil az elektromágneses sugárzással történő elbomlással szemben.**

Az elektronnak, noha nem áramlik, mégis van kinetikus energiája a H-atom alapállapotában. A kinetikus energia abból származik, hogy az elektron nem homogén módon tölti ki a teret, hanem a hullámfüggvényének gradiense van: **az elektron „nyüzsög”, vagy más szóval zérusponti kvantumfluktuációi**

⁶²Legfeljebb a normálási tényezőt választhatjuk komplexnek, de ennek nincsen helyfüggése, s így nem befolyásolja a valószínűségi áramsűrűség eltűnését.

vannak. Ez a nyüzsgés a határozatlansági reláció következménye. Minél inkább be akarja vonzani a Coulomb-erő az elektront a proton közelébe, annál kisebb Δr sugarú tartományra lesz az elektron lokalizálva, azaz annál kisebb lesz a helybizonytalansága. A határozatlansági reláció értelmében azonban ekkor megnő az elektron impulzusbizonytalansága $\Delta p \sim \hbar/\Delta r$ szerint. Így az elektron energiája közelítőleg

$$E(\Delta r) \approx \frac{(\Delta p)^2}{2\mu} - \alpha \frac{e^2}{\Delta r} \approx \frac{\hbar^2}{2\mu(\Delta r)^2} - \alpha \frac{e^2}{\Delta r} \quad (4.2.425)$$

összefüggés szerint függ az elektron helybizonytalanságától. Itt felhasználtuk, hogy az elektron impulzusának várható értéke zérus, úgyhogy a kietikus energia várható értéke teljesen az impulzus-bizonytalanságból származik. A Természet az elektron helybizonytalanságát az alapállapotban úgy állítja be, hogy az elektron energiája minimális legyen:

$$\frac{dE(\Delta r)}{d\Delta r} = -\frac{\hbar^2}{\mu(\Delta r)^3} + \alpha \frac{e^2}{(\Delta r)^2} = 0 \quad (4.2.426)$$

ahonnan

$$\Delta r \approx \frac{\hbar^2}{\mu\alpha e^2} = r_B. \quad (4.2.427)$$

A helybizonytalanság becsült értéke tehát a Bohr-sugárral azonos. Ez a határozatlansági elven alapuló becslés az alapállapot esetében nagyon jól működik, hiszen az egzakt (a radiális hullámfüggvény pontos alakját felhasználó) számítás szerint

$$\Delta r = \sqrt{\bar{r}^2 - \bar{r}^2} = \sqrt{3 - \left(\frac{3}{2}\right)^2} r_B \approx 0,866 r_B. \quad (4.2.428)$$

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,

$$j_r = j_\theta = 0, \quad (4.2.429)$$

de a valószínűségi áramsűrűség j_φ komponense lehet zérustól különböző:

$$j_\varphi = \frac{i\hbar}{2\mu r \sin \theta} [\phi_{n,\ell,m} \partial_\varphi \phi_{n,\ell,m}^* - \phi_{n,\ell,m}^* \partial_\varphi \phi_{n,\ell,m}]. \quad (4.2.430)$$

Itt felhasználtuk, hogy a gradiens-operátor φ -komponense $(r \sin \theta)^{-1}(\partial/\partial\varphi)$. Tudjuk, hogy a stacionárius állapotok hullámfüggvényei φ -tól $e^{im\varphi}$ alakban függenek, ezért

$$j_\varphi = \frac{m\hbar}{\mu r \sin \theta} |\phi_{n,\ell,m}|^2, \quad (4.2.431)$$

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 pálya-impulzusmomentumnak ilyenkor nullától különböző vetülete, másrészt arra lehet belőle következtetni, hogy a H-atomnak az elektron pálya-impulzusmomentumból 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

$$dM_z = -\frac{e}{c} A di = -\frac{e}{c} dr r d\theta j_\varphi \pi r^2 \sin^2 \theta \quad (4.2.432)$$

járulékot adnak a mágneses momentumhoz (CGS-rendszert használtunk, hogy explicit módon megjelenjen a vákuumbeli c fénysebesség képletekben). Ha ezeket a járulékokat az összes elemi köráramra felösszegezzük, akkor megkapjuk a teljes mágneses momentumot:

$$\begin{aligned} M_z &= -\frac{em\hbar}{2\mu c} \int_0^\infty dr r^2 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin \theta |\phi_{n,\ell,m}|^2 \\ &= -\frac{em\hbar}{2\mu c} \int dV |\phi_{n,\ell,m}|^2 = -\frac{em\hbar}{2\mu c} \equiv -m\mu_B \end{aligned} \quad (4.2.433)$$

ahol kihasználtuk, hogy $|\phi_{n,\ell,m}|^2$ nem függ φ -től (és m -től sem) és ezért a hullámfüggvény normálási integrálja jelent meg az egyenlet jobb oldalán. Végül bevezettük a

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2\mu c} \quad (4.2.434)$$

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:

$$M_z = -\frac{e}{2\mu c} \ell_z \quad (4.2.435)$$

a CGS egységrendszerben. Az SI rendszerben

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \approx 9,3 \cdot 10^{-24} \text{ J/T}. \quad (4.2.436)$$

(A mágneses fluxus egysége $1\text{T} = 1 \text{ kg s}^{-2} \text{ A}^{-1}$.)

A pályaimpulzusmomentum és z -irányú vetületének értéke, azaz az (ℓ, m) kvantumszámok azt határozzák meg, hogy hogyan viselkedik a hullámfüggvény a koordináta-rendszernek az atom tömegközéppontja körüli elforgatásakor. Az ezt leíró $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ gömbfelületi függvények az elektron megtalálási valószínűségének jellegzetes irányfüggést kölcsönöznek. Az elektron megtalálási valószínűsége a TKP-től adott r távolságban arányos $|Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)|^2$ -tel, és ez a tényező határozza meg az irányfüggést. Példaként megadjuk a

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta |Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)|^2 = 1 \quad (4.2.437)$$

normálási feltételre normált gömfelületi függvények közül az s -, p - és d -állapotokat jellemzők explicit alakját:

$$\begin{aligned}
Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\
Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}, \\
Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad Y_{2,\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\varphi}, \\
Y_{2,\pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}.
\end{aligned} \tag{4.2.438}$$

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.

4.2.16. Részecske szóródása centrális potenciálon. Szórási amplitúdó és hatáskeresztmetszet

Szóráskísérlet és szórási hatáskeresztmetszet. Nagyon sokszor egy fizikai rendszerről úgy szerzünk ismeretet, hogy szóráskísérletet végzünk. A vizsgált fizikai rendszert, mint **céltárgyat**, idegen szóval **targetet** valamilyen részecskékkel bombázzuk és azt figyeljük, hogy ezek a részecskék hogyan viselkednek a céltárggyal történő kölcsönhatás után. Már a klasszikus fizikában egy részecske (pontszerűnek tekinthető test) megfigyelése is tulajdonképpen szóráskísérlet, amikor azt vizsgáljuk, hogy a részecskére bocsátott fény (elektromágneses sugárzás) hogyan szóródik a részecskén. Az atomi és szubatomi méretű fizikai rendszerek vizsgálatának pedig az egyik legjelentősebb vizsgálati módszere, hogy a vizsgált rendszeren másik részecskét vagy elektromágneses sugárzást szóratunk.

A szóráskísérlet lényege, hogy egy részecskeforrás (gyorsító) adott impulzusú, ill. v_{be} sebességű részecskékből álló **részecskenyalábot** állít elő a céltárgytól nagy L távolságban. Általában feltesszük, hogy a nyaláb F keresztmetszetének lineáris méretei sokkal kisebbek, mint a részecskeforrás és a céltárgy közti távolság, $\sqrt{F} \ll L$ és ugyanakkor sokkal nagyobbak, mint a kibocsátott részecskék de Broglie-féle $\lambda_{be} = \frac{h}{mv_{be}}$ hullámhossza, $\sqrt{F} \gg \lambda_{be}$, és sokkal nagyobbak, mint a céltárgy nyaláb keresztmetszetére merőleges vetületének F' területe lineáris méretei, $F \gg F'$. A nyaláb részecskéi kölcsönhatnak a céltárggyal, egy részük változatlanul továbbhalad, más részük irányt változtat. A céltárgytól $R \gg \sqrt{F}$ távolságban, tetszőleges irányokban

detektort helyezünk el és megfigyeljük, hogy mennyi részecske szóródik időegység alatt a detektorba.

A szórás jellemzésére bevezetjük a differenciális és a totális szórási hatáskeresztmetszet fogalmát. A továbbiakban rugalmas szórásról fogunk csak beszélni, amikor sem a bombázó részecske, sem a target-részecske nem gerjesztődik. A targetet rögzítettnek tekintjük és egy centrális potenciállal modellezzük. A koordináta-rendszerünk origóját a potenciál centrumába helyezzük. Legyen a nyaláb hengersizmetrikus és legyen a nyaláb tengelye a z -tengely. A szórt részecskék detektálására helyezzünk el **részecskedetektort** a (θ, φ) gömbi polárszögekkel jellemzett irányban. Jelölje $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ azt a térszöget, amilyen térszög alatt a detektor infinitezimális méretű ablaka látszik a potenciál centrumából nézve. A detektort olyan nagy r távolságra (és olyan irányban) helyezzük el, hogy $|r \sin \theta \cos \varphi|$, $|r \sin \theta \sin \varphi| \gg \sqrt{F}$ legyen. Az előreszórás ($\theta \approx 0$) és a hátraszórás ($\theta \approx \pi$) mérése problematikus lehet, mert meg kell különböztetni a az így szórt részecskéket a bombázó részecskéktől, de ezzel a mérés technikai nehézséggel most nem foglalkozunk. A bejövő részecskenyaláb részecskéi v_{be} nagyságú, z -irányú sebességgel rendelkeznek, a hullámfüggvényük, $\psi_{be} = Ae^{ikz}$ síkhullám, ahol $v_{be} = \hbar k/m$, m a bombázó részecskék tehetetlen tömege. A normálási tényezőt válasszuk úgy, hogy a bejövő részecskék valószínűségi áramsűrűségének nagysága

$$j_{be} = \frac{\hbar k}{m} |A|^2 = v_{be} |A|^2 = v_{be} n_{be} \quad (4.2.439)$$

legyen, ahol n_{be} a bejövő részecskenyalábban a részecskék térfogati sűrűsége (a nyaláb egységnyi térfogatában található részecskék száma). Utóbbiról az egyszerűség kedvéért feltesszük, hogy időben és térben állandó a nyaláb belsejében. Választásunk annak felel meg, hogy a nyaláb V térfogatára a bejövő részecskék hullámfüggvénye

$$\int_V dV |\psi_{be}|^2 = n_{be} V \quad (4.2.440)$$

feltétellel van normálva, vagyis a ψ_{be} hullámfüggvény abszolút értékének négyzetét a homogén nyaláb V térfogatára integrálva megkapjuk a nyaláb V térfogatában található részecskék számát. A nyalábra merőleges F keresztmetszeten dt idő alatt belépő részecskék száma

$$dN_{be} = F v_{be} dt n_{be} = F j_{be} dt. \quad (4.2.441)$$

A valószínűségi áramsűrűség tehát megadja a nyaláb egységnyi keresztmetszetén időegység alatt belépő részecskék számát.

Ha betartjuk a kísérleti elrendezés geometriai méretére vonatkozó, fentebb részletezett feltételeket, akkor a detektor csak a szóródott részecskéket érzékeli, azokat nem, amelyek szóródás nélkül haladnak tovább az eredeti irányban. A dt idő alatt az r sugarú gömbfelületnek a detektor ablaka által lefedett $r^2 d\Omega$ felületén

$$dN_{sz} = r^2 d\Omega j_{sz} dt \quad (4.2.442)$$

számú szórt részecske lép át a gömbfelületre merőlegesen. Itt j_{sz} a szórt részecskék valószínűségi áramsűrűségének a radiális komponense, a radiális irányra merőleges egységfelületen időegység alatt átlépő részecskék száma. A szórás a $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ differenciális szórási hatáskeresztmetszettel jellemezzük, amelyet az időegység alatt $d\Omega$ térszögbe szórt részecskék $r^2 j_{sz} d\Omega$ száma és az időegység alatt a nyaláb egységfelületén belépő részecskék j_{be} számának arányával definiálunk:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{r^2 j_{sz} d\Omega}{j_{be}}, \quad (4.2.443)$$

ahol a definíció során felhasználtuk, hogy az egyenlőség jobb oldala arányos a $d\Omega$ térszöggel. Innen azt kapjuk, hogy

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r^2 j_{sz}}{j_{be}}. \quad (4.2.444)$$

Az időegység alatt 4π térszögbe szórt részecskék teljes számát viszonyítva a bejövő részecskék valószínűségi áramsűrűségéhez, megkapjuk a totális szórási hatáskeresztmetszetet:

$$\sigma = \frac{\int_{4\pi} r^2 j_{sz} d\Omega}{j_{be}} = \int_{4\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \quad (4.2.445)$$

Ezt elvileg egy olyan detektor mérné, amelyik adott sugáron 4π térszögben körülveszi a targetet és nem érzékeli hátrairányban a még nem szórt, ill. előre irányban a szórás nélkül továbbhaladó részecskéket.

Ha klasszikus, pontszerű golyócskák szóródnának egy véges kiterjedésű klasszikus fizikai targeten, amellyel csak akkor hatnak kölcsön, ha érintkezésbe lépnek vele, akkor a szórt golyócskák teljes száma megegyezne azon golyócskák számával, amelyek beleütköznek a targetbe. Időegység alatt ekkor $F' v_{be} n_{be} = F' j_{be}$ számú golyócska ütközik a targetbe, ahol F' a klasszikus fizikai target nyalábirányra merőleges vetületének területe. Ezért ekkor a teljes szórási hatáskeresztmetszet

$$\sigma = \frac{F' j_{be}}{j_{be}} = F', \quad (4.2.446)$$

azaz a targetnek a nyalábirányra merőleges geometriai keresztmetszete. Természetesen ilyen közvetlen geometriai jelentés már akkor sem adható a hatáskeresztmetszetnek, ha a részecskék és a target kölcsönhatásához nem szükséges a közvetlen érintkezés. Még kevésbé lehet ilyen geometriai jelentést tulajdonítani a hatáskeresztmetszetnek, ha a bombázó részecskék és a target is kvantummechanikai objektumok.

A totális hatáskeresztmetszet terület dimenziójú fizikai mennyiség. Egysége $1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$.

Az alábbiakban megmutatjuk, hogyan lehet kiszámítani a kvantummechanika eszközeivel a differenciális szórási hatáskeresztmetszetet. Csak azzal az esettel fogunk foglalkozni, amikor sem a bombázó részecskék, sem a target nem gerjesztődik a szórási folyamatban, vagyis amikor a szórási folyamat úgynevezett rugalmas szórás.

A szórási amplitudó és a differenciális szórási hatáskeresztmetszet. **Tegyük fel, hogy a részecske olyan potenciálban mozog, amely a térbeli végtelenben eltűnik és a részecske E energiája nem negatív, $E \geq 0$, akkor a Schrödinger-egyenlet stacionárius megoldásait szórási állapotoknak nevezzük.** Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy a $V(r)$ potenciál centrális, azaz csak az r radiális koordinátától függ, ami a potenciál centrumától mért távolság. Ekkor a stacionárius Schrödinger-egyenletet célszerű ismét gömbi polárkoordinátás alakban felírni:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{\ell}^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi). \quad (4.2.447)$$

Ha bevezetjük a $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ hullámszámot, akkor az egyenletet átírhatjuk

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi(r, \theta, \varphi)}{\partial r} \right) + \left[k^2 - \frac{\hat{\ell}^2}{\hbar^2 r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = 0 \quad (4.2.448)$$

alakba. Ha a részecskenyaláb hengerszimmetrikus, akkor a potenciálon szóródó részecske ψ hullámfüggvénye nem függhet a φ szögtől, tehát ekkor $\psi(r, \theta)$. Ezt a továbbiakban feltételezzük az egyszerűség kedvéért.

Az egyenlet megoldását megfelelő **határfeltétellel** kell keresni, amelyik illeszkedik a szórás kísérlet feltételeihez. Ha a bejövő részecske hullámfüggvényét az e^{ikz} síkhullámmal közelítjük, ahol $\hbar k = mv_{be}$, a szórt hullámot meg a ψ_{sz} hullámfüggvény írja le a szórócentrumtól nagy r távolságban, akkor a stacionárius hullámfüggvénynek a potenciáltól nagy távolságban

$$\psi(r, \theta) \sim e^{ikz} + \psi_{sz}(r, \theta) \quad (4.2.449)$$

alakúnak kell lennie. Mi több, a szórt hullám csak kifutó gömbhullámokat tartalmazhat,

$$\psi_{sz}(r, \theta) \sim f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (4.2.450)$$

ahol az $f(\theta)$ szögfüggő szorzótényezőt **szórási amplitudónak** nevezzük. **A szórási amplitudót tehát a stacionárius Schrödinger-egyenlet megoldásának aszimptotikus alakjából tudjuk kiolvasni.**

Mielőtt rátérnénk a stacionárius Schrödinger-egyenlet ilyen határfeltételt kielégítő megoldásának megkeresésére, megmutatjuk, hogy **a szórási amplitudó, amelyet a stacionárius Schrödinger-egyenlet megoldásának aszimptotikus alakjából olvasunk ki, meghatározza a differenciális szórási hatáskeresztmetszetet:**

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2. \quad (4.2.451)$$

Csakugyan, a szórt hullám valószínűségi áramsűrűség-vektorának radiális komponense (korábbi jelölésünkben j_{sz}) az aszimptotikus tartományban:

$$\begin{aligned} j_{sz}(r, \theta) &\sim \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi_{sz} \frac{\partial}{\partial r} \psi_{sz}^* - \psi_{sz}^* \frac{\partial}{\partial r} \psi_{sz} \right) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi_{sz} \left(-ik - \frac{1}{r} \right) \psi_{sz}^* - \psi_{sz}^* \left(ik - \frac{1}{r} \right) \psi_{sz} \right] \\ &= \frac{\hbar k}{m} |\psi_{sz}|^2 = \frac{\hbar k}{mr^2} |f(\theta)|^2, \end{aligned} \quad (4.2.452)$$

ahol felhasználtuk, hogy az aszimptotikusan távoli tartományokban

$$\frac{\partial}{\partial r} \psi_{sz} = \left(ik - \frac{1}{r} \right) \psi_{sz}. \quad (4.2.453)$$

A differenciális szórási hatáskeresztmetszet tehát

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = \frac{r^2 j_{sz}}{j_{be}} = |f(\theta)|^2. \quad (4.2.454)$$

Ezt akartuk belátni.

*Centrális potenciálban mozgó részecskére és a szabad részecskére vonatkozó radiális Schrödinger-egyenlet megoldása.** A (4.2.448) egyenletben szereplő Hamilton-operátor felcserélhető a pályaimpulzusmomentum négyzetének $\hat{\ell}^2$ operátorával. Keressük ezért az egyenlet

$$\psi_{k,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = R_{k,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \quad (4.2.455)$$

alakú megoldásait, amelyek pályaimpulzusmomentum-sajátállapotok is egyúttal. A radiális hullámfüggvényre ekkor a

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_{k,\ell}(r)}{dr} \right) + \left[k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \right] R_{k,\ell}(r) = 0 \quad (4.2.456)$$

radiális Schrödinger-egyenletet kapjuk. Szabad mozgás esetén a (4.2.448) és a (4.2.456) egyenletben a potenciált zérusnak kell vegyük. A radiális egyenlet (4.2.456) alakja világosan mutatja, hogy a radiális hullámfüggvényt a k hullámszám (azaz az E energia) és az ℓ pályaimpulzusmomentum jellemzi.

A kinetikus energia (pontosabban a radiális impulzus) operátorának önadjungáltságát az biztosítja, hogy a $\chi_{k,\ell}(r) = r R_{k,\ell}(r)$ függvény az origóban eltűnik, $\chi_{k,\ell}(0) = 0$.

A nagy $r \rightarrow \infty$ távolságokon megvizsgálhatjuk a radiális hullámfüggvény aszimptotikus viselkedését. Ennek a

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) R_{k,\ell}(r) \sim -k^2 R_{k,\ell}(r) \quad (4.2.457)$$

egyenletet kell kielégítenie. Világos, hogy ennek az egyenletnek két független megoldása van,

$$R^{[ki]}(r) \sim \frac{e^{ikr}}{r}, \quad R^{[be]}(r) \sim \frac{e^{-ikr}}{r}, \quad (4.2.458)$$

amelyek rendre a potenciál centrumából kifutó, ill. oda befutó gömbhullámot írnak le, ha megszorozzuk őket a stacionárius állapot időfüggését meghatározó $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ fázistényezővel. A pozitív energiás stacionárius állapotok $\psi_{k,\ell,m}(r, \theta, \varphi)$ hullámfüggvénye tehát az aszimptotikus $r \rightarrow \infty$

térbeli tartományokban általában egy kifutó és egy befutó gömbhullám lineáris kombinációja kell legyen:

$$R_{k,\ell}(r) \sim A_{k,\ell} \frac{e^{ikr}}{r} + B_{k,\ell} \frac{e^{-ikr}}{r} \sim \frac{\chi_{k,\ell}(r)}{r}. \quad (4.2.459)$$

Az $A_{k,\ell}$ és $B_{k,\ell}$ lineárkombinációs együtthatókat a

$$\int_0^\infty r^2 dr R_{k',\ell}^*(r) R_{k,\ell}(r) = 2\pi\delta(k' - k) \quad (4.2.460)$$

normálási feltétel és az $[rR_{k,\ell}(r)]_{r=0} = 0$ határfeltétel rögzíti, de meglehetősen implicit módon. Az ortonormáltsági feltételbe és a origóban kirótt határfeltételbe az egzakt megoldást kell ugyanis behelyettesíteni.

1. Vizsgáljuk először a szabad részecske mozgását. Az $\ell = 0$ esetben a radiális hullámfüggvényre vonatkozó (4.2.457) egyenlet nemcsak az aszimptotikus tartományban áll fenn, hanem egzaktul igaz az $r \in [0, \infty)$ intervallumon. Az $R_{k,0}(r)$ megoldás tehát az egész $r \in [0, \infty)$ intervallumon (4.2.459) alakú. A $\chi_{k,0}(0) = 0$ határfeltételnek eleget tevő megoldásra tehát

$$A_{k,0} + B_{k,0} = 0, \quad B_{k,0} = -A_{k,0}, \quad (4.2.461)$$

úgyhogy

$$R_{k,0} = \frac{A_{k,0}}{r} (e^{ikr} - e^{-ikr}) = \frac{2iA_{k,0}}{r} \sin(kr). \quad (4.2.462)$$

A (4.2.460) ortonormáltsági feltételből $|A_{k,0}|^2 = 1$, ami megengedi az $A_{k,0} = -i$ választást; ekkor

$$\psi_{k,0,0}(r, \theta, \varphi) = \frac{2}{r} \sin(kr) Y_{0,0}. \quad (4.2.463)$$

Szabad részecske esetén az $\ell > 0$ esetben a radiális Schrödinger-egyenlet

$$-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R_{k,\ell} \right) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R_{k,\ell} = k^2 R_{k,\ell} \quad (4.2.464)$$

alakot ölt. Keressük ennek a megoldását $R_{k,\ell}(r) = C_{k,\ell} r^\ell \phi_{k,\ell}(r)$ alakban, ahol $C_{k,\ell}$ normálási együttható. A már tárgyalt $\ell = 0$ speciális esetben: $R_{k,0}(r) = \phi_{k,0}(r) = \frac{2}{r} \sin kr$. Ekkor $\ell > 0$ esetén behelyettesítéssel a

$$\phi_{k,\ell}'' + \frac{2(\ell+1)}{r} \phi_{k,\ell}' + k^2 \phi_{k,\ell} = 0 \quad (4.2.465)$$

differenciálegyenletet kapjuk a $\phi_{k,\ell}(r)$ függvényekre. Vegyük észre, hogy ha deriváljuk a (4.2.465) egyenlet mindkét oldalát r szerint,

$$\phi_{k,\ell}''' + \frac{2(\ell+1)}{r} \phi_{k,\ell}'' + \left[k^2 - \frac{2(\ell+1)}{r^2} \right] \phi_{k,\ell}' = 0, \quad (4.2.466)$$

majd $\phi_{k,\ell}'(r) = r\chi(r)$ helyettesítéssel élünk, akkor a $\chi(r)$ függvényre kapott

$$\chi'' + \frac{2(\ell+2)}{r} \chi' + k^2 \chi = 0 \quad (4.2.467)$$

egyenlet pontosan azonos a (4.2.465) egyenlettel, ha abban ℓ -et $(\ell+1)$ -gyel helyettesítjük. Mondhatjuk tehát, hogy $\chi(r) = \phi_{k,\ell+1}(r)$, ami azt jelenti, hogy rekurziós képletet találtunk a $\phi_{k,\ell}(r)$ függvények meghatározására:

$$\phi_{k,\ell+1}(r) = \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \phi_{k,\ell}(r). \quad (4.2.468)$$

Ennek megoldása:

$$\phi_{k,\ell}(r) = \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^\ell \phi_{k,0}(r) = \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^\ell \frac{2 \sin(kr)}{r}. \quad (4.2.469)$$

Az $R_{k,\ell}(r)$ függvényekre vonatkozó ortonormáltsági feltételből a normálási együtthatókra $|C_{k,\ell}|^2 = k^{-2\ell}$ adódik, ami megengedi a $C_{k,\ell} = (-1)^\ell / k^\ell$ választást. Ekkor a szabad mozgásra vonatkozó, ℓ impulzusmomentumhoz tartozó radiális hullámfüggvény alakja

$$R_{k,\ell}(r) = (-1)^\ell \frac{2r^\ell}{k^\ell} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^\ell \frac{\sin(kr)}{r} = 2k(-1)^\ell (kr)^\ell \left(\frac{1}{kr} \frac{d}{d(kr)}\right)^\ell \frac{\sin(kr)}{kr} \equiv 2kj_\ell(kr), \quad (4.2.470)$$

ahol $j_\ell(u)$ ($0 \leq u$) az úgynevezett ℓ -edrendű szférikus Bessel-függvények.

A fentieket összegezve azt mondhatjuk, hogy gömbi polárkoordinátákban a szabad mozgás stacionárius Schrödinger-egyenletének álló gömbhullámokat leíró $\psi_{k,\ell,m}(r, \theta, \varphi)$ megoldásai vannak, amelyek az $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ energiasajátértékhez és a pályaimpulzusmomentum négyzetének, ill. vetületének rendre $\hbar^2 \ell(\ell+1)$, ill. $\hbar m$ sajátértékéhez tartozó sajátállapotok. Ezek olyan

$$\psi_{k,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = 2kj_\ell(kr)Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \quad (4.2.471)$$

állapotok, amelyekben a pályaimpulzusmomentum négyzetének és z -irányú vetületének vannak jól definiált értékei, viszont amelyekben a részecske impulzusa nem jól definiált, azaz ezek nem impulzus sajátállapotok.

Vizsgáljuk még meg, hogy hogyan viselkednek a szabad mozgást leíró $R_{k,\ell}(r)$ radiális hullámfüggvények az $r \rightarrow \infty$ aszimptotikus tartományban. Az aszimptotikus viselkedést az r növekedtével leglassabban csökkenő tag határozza meg, amelyet akkor kapunk meg, ha a radiális hullámfüggvény implicit kifejezésében kijelölt deriváltak mind a szögfüggvény hatványára hatnak,

$$R_{k,\ell}(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} (-1)^\ell \frac{2r^\ell}{k^\ell} \frac{1}{r^\ell} \frac{d^\ell}{dr^\ell} \sin(kr). \quad (4.2.472)$$

Felhasználva, hogy minden egyes deriválás a szinuszfüggvény $(-k)$ -val történő szorzását és argumentumának $(-\pi/2)$ -vel történő eltolását jelenti, azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} R_{k,\ell} &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} (-1)^\ell \frac{2}{k^\ell r} (-k)^\ell \sin\left(kr - \ell \frac{\pi}{2}\right) \\ &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2 \sin(kr - \ell \frac{\pi}{2})}{r} \end{aligned} \quad (4.2.473)$$

a szabad mozgás radiális hullámfüggvényeinek aszimptotikus alakja. Ahogy az aszimptotikus tartományban érvényes (4.2.457) egyenlet általános megoldásától várjuk, a kapott (4.2.473) aszimptotikus alak kifutó és befutó gömbhullámok lineáris kombinációja:

$$\begin{aligned} R_{k,\ell} &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2 \sin(kr - \ell \frac{\pi}{2})}{r} = \frac{1}{i} \left[\frac{e^{i(kr - \ell \frac{\pi}{2})}}{r} - \frac{e^{-i(kr - \ell \frac{\pi}{2})}}{r} \right] \\ &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{i} \left[(-i)^\ell \frac{e^{ikr}}{r} - i^\ell \frac{e^{-ikr}}{r} \right]. \end{aligned} \quad (4.2.474)$$

A szabad részecske impulzus-sajátállapotát leíró hullámfüggvényének kifejtése pályaimpulzusmomentum-sajátállapotok ortonormált teljes rendszere szerint. Ezt a síkhullám parciális hullámok szerinti kifejtésének nevezzük. Mozogjon a részecske a z -tengely irányában $\hbar k$ nagyságú impulzussal, azaz legyen a részecske a $\hat{p}$ impulzus-operátor $\vec{p} =$

$(0, 0, \hbar k)$ sajátértékkel jellemzett sajátállapotában (a Descartes-komponenseket tüntettük fel). Ekkor a részecske hullámfüggvénye (a szabad részecske Descartes-koordinátákban felírt stacionárius Schrödinger-egyenletének megoldása) e^{ikz} . (A hullámfüggvényt úgy normáltuk, hogy z -irányú valószínűségi áramsűrűsége $\hbar k/m$ legyen.) Fejtsük ezt ki a $\psi_{k,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = R_{k,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$ gömhullám-megoldások szerint. Mivel $e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta}$ a z -tengely körüli elforgatásokkal szemben szimmetrikus, azaz független a φ szögtől, azért a kifejtésben csak a φ szögtől független

$$\psi_{k,\ell,0}(r, \theta) = R_{k,\ell}(r)Y_{\ell,0}(\theta), \quad Y_{\ell,0}(\theta) = i^\ell \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell(\cos \theta) \quad (4.2.475)$$

függvények szerepelhetnek:

$$e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_\ell R_{k,\ell}(r)Y_{\ell,0}(\theta). \quad (4.2.476)$$

Itt $P_\ell(u)$ a

$$P_\ell(u) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{du^\ell} (u^2 - 1)^\ell, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, \quad u \in [-1, +1] \quad (4.2.477)$$

összefüggéssel definiált Legendre-polinomok, amelyek ortogonális polinomokként az alábbi ortonormáltsági feltételt elégítik ki:

$$\int_{-1}^{+1} du P_\ell(u) P_{\ell'}(u) = \frac{2}{2\ell+1} \delta_{\ell,\ell'}. \quad (4.2.478)$$

Felhasználva a Legendre-polinomok ortonormáltságát, az a_ℓ sorfejtési együtthatók meghatározhatók a

$$2 = \int_{-1}^{+1} du = \int_0^\pi \sin \theta \, d\theta |e^{ikz}|^2 \quad (4.2.479)$$

feltételből. Végül a síkhullám parciális hullámok szerinti kifejtése

$$\begin{aligned} e^{ikz} &= \sum_{\ell=0}^{\infty} (-i)^\ell (2\ell+1) P_\ell(\cos \theta) j_\ell(kr) \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} (-i)^\ell (2\ell+1) P_\ell(\cos \theta) \left(\frac{r}{k}\right)^\ell \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^\ell \frac{\sin(kr)}{kr} \end{aligned} \quad (4.2.480)$$

alakban adódik. A síkhullám gömhullámok szerinti kifejtésének aszimptotikus alakja $r \rightarrow \infty$ esetén

$$\begin{aligned} e^{ikz} &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell (2\ell+1) P_\ell(\cos \theta) \frac{\sin(kr - \ell \frac{\pi}{2})}{kr} \\ &\sim \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{i^\ell (2\ell+1) P_\ell(\cos \theta)}{2ikr} [(-i)^\ell e^{ikr} - i^\ell e^{-ikr}] \\ &\sim \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{i^\ell (2\ell+1) (-i)^\ell P_\ell(\cos \theta)}{2ikr} [e^{ikr} + (-1)^{\ell+1} e^{-ikr}]. \end{aligned} \quad (4.2.481)$$

Szemléletesen mondva: a bejövő síkhullámnak adott pályaimpulzusmomentumú parciális hullámokra történő felbontása olyan, mintha a befutó síkhullámot a szórási síkra merőleges

tengely irányába mutató $\ell_{kl} = \sqrt{\hbar^2 \ell(\ell+1)}$ „klasszikus” pályaimpulzusmomentumú, azaz $b = \frac{\ell_{kl}}{k\hbar} = \frac{\sqrt{\ell(\ell+1)}}{k}$ ütközési paraméterű komponensekre bontottuk volna. A szórási probléma megoldását vissza fogjuk vezetni az egyes parciális hullámoknak a centrális potenciálon történő szóródására.

2. Vizsgáljuk most a centrális potenciálban mozgó részecske esetén a radiális hullámegyenlet aszimptotikus alakját. Ha a centrális potenciál az aszimptotikus $r \rightarrow \infty$ tartományban elég gyorsan eltűnik, akkor most is a (4.2.457) egyenlet írja le az aszimptotikus viselkedést. Ez azt jelenti, hogy a radiális hullámfüggvény most is befutó és kifutó gömbhullámok lineáris kombinációja. Behelyettesítéssel könnyű belátni, hogy a (4.2.457) egyenletnek általános megoldása az

$$R_{k,\ell} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{i} \left[(-i)^\ell \frac{e^{ikr+i\delta_\ell(k)}}{r} - i^\ell \frac{e^{-ikr-i\delta_\ell(k)}}{r} \right] = \frac{2 \sin[kr - \ell \frac{\pi}{2} + \delta_\ell(k)]}{r} \quad (4.2.482)$$

aszimptotikus alak. Itt a $\delta_\ell(k)$ energiafüggő fáziseltolódásokat az egzakt

$$-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R_{k,\ell} \right) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R_{k,\ell} + \frac{2m}{\hbar^2} V(r) R_{k,\ell} = k^2 R_{k,\ell} \quad (4.2.483)$$

radiális Schrödinger-egyenletnek az $[r R_{k,\ell}(r)]_{r=0} = 0$ határfeltételt kielégítő megoldásából kell kiolvasni, meghatározva az egzakt $R_{k,\ell}(r)$ radiális hullámfüggvény aszimptotikus alakját és összehasonlítva azt a (4.2.482) alakkal. A különböző pályaimpulzusmomentumú hullámok fáziseltolódását a potenciál alakja határozza meg.

A centrális potenciálon szóródó részecske hullámfüggvényének felbontása parciális hullámokra. Az előzőekben megkerestük a (4.2.448) stacionárius Schrödinger-egyenlet olyan $\psi_{k,\ell,m}$ megoldásait, amelyek egyúttal pályaimpulzusmomentum-sajátfüggvények. Ezeket a megoldásokat **parciális hullámoknak** szokás nevezni. A következő feladatunk, hogy megkeressük a (4.2.448) stacionárius Schrödinger-egyenlet azon megoldását, amelyik kielégíti a szórás kísérlethez illeszkedő határfeltételeket. Ez a megoldás a parciális hullámok olyan

$$\psi_k(r, \theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \tilde{A}_{k,\ell} Y_{\ell,0}(\theta, \varphi) R_{k,\ell}(r) = \sum_{\ell=0}^{\infty} A_{k,\ell} P_\ell(\cos \theta) R_{k,\ell}(r) \quad (4.2.484)$$

lineáris kombinációja kell legyen, amely aszimptotikusan (4.2.449) alakú. A (4.2.484) alakot behelyettesítve a (4.2.448) stacionárius Schrödinger-egyenletbe és felhasználva a gömbfüggvények

$$\int_{(4\pi)} d\Omega Y_{\ell',0}(\theta, \varphi) Y_{\ell,0}(\theta, \varphi) = \delta_{\ell',\ell} \quad (4.2.485)$$

ortogonalitását, visszkapjuk az egyes parciális hullámok $R_{k,\ell}(r)$ radiális hullámfüggvényeire a (4.2.456) radiális Schrödinger-egyenletet. Ennek megoldásáról tudjuk, hogy aszimptotikusan (4.2.482) alakú. Ugyanakkor a (4.2.448) egyenlet megoldásától megköveteljük, hogy aszimptotikusan (4.2.449) alakú legyen, azaz hogy a ψ_{sz} szórt hullám ne tartalmazzon befutó gömbhullám-komponenst. Ez azt jelenti,

hogy a ψ megoldásban a befutó parciális hullámoknak pontosan olyan súllyal kell előfordulniuk, mint amilyenekkel azok a bejövő részecskét leíró síkhullámban vannak jelen. Ez a feltétel egyértelműen rögzíti a parciális hullámok szerinti kifejtésben szereplő $A_{k,\ell}$ együtthatókat. Explicit kifejezésüket behelyettesítve a szórt hullám aszimptotikus alakjába, leolvashatjuk az $f(\theta)$ szórás amplitudó kifejezését.

Az egyes radiális hullámok (4.2.482) aszimptotikus alakját felhasználva, a (4.2.448) egyenlet megoldásának aszimptotikus alakja

$$\psi(r, \theta) \sim \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{A_{k,\ell} P_{\ell}(\cos \theta)}{ir} e^{-i\delta_{\ell}} (-i)^{\ell} [e^{ikr+2i\delta_{\ell}} + (-1)^{\ell+1} e^{-ikr}]. \quad (4.2.486)$$

Ennek és a síkhullám (4.2.481) aszimptotikus alakjának a segítségével, a szórt hullám aszimptotikus alakjára az adódik, hogy

$$\begin{aligned} \psi_{sz}^{(as)}(r, \theta) &\sim \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{A_{k,\ell} P_{\ell}(\cos \theta)}{ir} e^{-i\delta_{\ell}} (-i)^{\ell} [e^{ikr+2i\delta_{\ell}} + (-1)^{\ell+1} e^{-ikr}] \\ &- \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{i^{\ell} (2\ell+1) P_{\ell}(\cos \theta)}{2ikr} (-i)^{\ell} [e^{ikr} + (-1)^{\ell+1} e^{-ikr}] \\ &\sim \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{P_{\ell}(\cos \theta)}{2ikr} (-i)^{\ell} \left[2k A_{k,\ell} e^{-i\delta_{\ell}} e^{ikr+2i\delta_{\ell}} - i^{\ell} (2\ell+1) e^{ikr} \right] \\ &+ (-1)^{\ell+1} [2k A_{k,\ell} e^{-i\delta_{\ell}} - i^{\ell} (2\ell+1)] e^{-ikr}. \end{aligned} \quad (4.2.487)$$

A szórt hullám (4.2.449) aszimptotikus alakjának megkövetelése egyenértékű avval, hogy a fenti egyenlet jobb oldalán a befutó gömbhullámok amplitúdói tűnjenek el, azaz hogy az $A_{k,\ell}$ kifejtési együtthatók

$$A_{k,\ell} = \frac{i^{\ell} (2\ell+1) e^{i\delta_{\ell}}}{2k} \quad (4.2.488)$$

legyenek. Ekkor a szórt hullám aszimptotikus alakja:

$$\begin{aligned} \psi_{sz}^{as} &\sim \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{P_{\ell}(\cos \theta)}{2ikr} (-i)^{\ell} [2k A_{k,\ell} e^{-i\delta_{\ell}} e^{ikr+2i\delta_{\ell}} - i^{\ell} (2\ell+1) e^{ikr}] \\ &\sim \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{P_{\ell}(\cos \theta)}{2ikr} (-i)^{\ell} i^{\ell} (2\ell+1) [e^{2i\delta_{\ell}} - 1] e^{ikr} \\ &\sim f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \end{aligned} \quad (4.2.489)$$

ahonnan kiolvashatjuk a szórás amplitudó kifejezését:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \left(e^{2i\delta_{\ell}} - 1 \right) P_{\ell}(\cos \theta) \equiv \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) f_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta). \quad (4.2.490)$$

Ebben a fejezetben mindvégig felhasználtuk a bombázó részecske iránya körüli tengelyszimmetriát. Az $f(\theta)$ szórás amplitudó kifejezésében szereplő $\delta_{\ell}(k)$ **a szórt ki-futó gömbhullám fáziseltolódása** a potenciál centrumától távol, amelyet az egyes

$R_{k,\ell}$ parciális hullámokra vonatkozó radiális Schrödinger-egyenlet megoldásának aszimptotikus alakjából kell kiolvasni. Az

$$f_\ell = \frac{1}{2ik} \left(e^{2i\delta_\ell(k)} - 1 \right) \quad (4.2.491)$$

mennyiségeket **parciális amplitudóknak** szokás nevezni. **A teljes szórási amplitudó az egyes parciális amplitudóknak a megfelelő Legendre-polinomokkal és a pályamomentum vetületének multiplicitásával súlyozott összege. A σ totális szórási hatáskeresztmetszet,**

$$\sigma = \int d\sigma = \int d\Omega |f(\theta)|^2 = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_\ell \quad (4.2.492)$$

a differenciális szórási hatáskeresztmetszetnek a teljes 4π térszögre vett integrálja, azaz az időegység alatt a 4π térszögbe szórt részecskék száma osztva a bejövő nyaláb valószínűségi áramsűrűségével, ahol

$$\sigma_\ell = 4\pi(2\ell + 1)|f_\ell|^2 = \frac{4\pi}{k^2}(2\ell + 1)\sin^2 \delta_\ell(k). \quad (4.2.493)$$

Az integrális szórási hatáskeresztmetszet a σ_ℓ parciális hatáskeresztmetszetek összege.

Látjuk tehát, hogy az egyes parciális hullámok additív módon járulnak hozzá a totális hatáskeresztmetszethez. Ez első pillantásra meglepő lehet, hiszen a szórási amplitudó maga is az egyes parciális hullámokra vonatkozó szórási amplitudók összege, s ezért a hatáskeresztmetszetben a különböző parciális amplitudók interferenciáját várhatnánk. Ilyen interferencia-tagok azonban csak a differenciális szórási hatáskeresztmetszetben lépnek fel, a totális (a térszögre kiintegrált) hatáskeresztmetszetben már nem, mert a különböző rendű Legendre-polinomok páronként ortogonálisak.

Az is figyelemre méltó, hogy ha a differenciális szórási hatáskeresztmetszetet adott energián valamelyik parciális hullám dominálja, azaz csak egyetlen ℓ -hez tartozó parciális hullám ad hozzá nem elhanyagolható járulékot, akkor a differenciális szórási hatáskeresztmetszet szögfüggése $d\sigma/d\Omega \sim P_\ell(\cos \theta)$ alapján a mért differenciális hatáskeresztmetszet szögfüggéséből közvetlenül el lehet dönteni, hogy melyik parciális hullámról van szó.

Látjuk, hogy a rugalmas szórási hatáskeresztmetszet⁶³ alapvetően $\sigma \sim 1/k^2 \sim 1/E$ módon függ a bombázó részecske energiájától, azaz fordítottan arányos vele.

⁶³Mivel potenciálszórást vizsgálunk, a totális szórási hatáskeresztmetszet egyúttal a rugalmas szórási hatáskeresztmetszet is, hiszen nincsen a rugalmas szóráson kívül más folyamat, ami bekövetkezhetne. A jelen jegyzet kereteit meghaladja azon szórási folyamatok tárgyalása, amikor a szórási folyamatban résztvevő részecskék maguk is gerjesztődhetnek, esetleg el is bomolhatnak részekre a folyamat közben. Utóbbi esetben a rugalmas szórás hatáskeresztmetszete kisebb, mint a totális szórási hatáskeresztmetszet, amelyhez definíció szerint valamennyi lehetséges folyamat hozzájárul. A szórási folyamatok leírásával a kvantummechanika szóráselmélet nevű ága foglalkozik.

5. RÉSZECSEKERENDSZEREK

A részecskerendszerek kvantummechanikája rendkívül gazdag és szerteágazó, mind a szóhajóhető fizikai rendszereket, mind pedig a rájuk vonatkozó Schrödinger-egyenlet megoldási módszereit illetően. A kvantummechanika általános érvényű elvei természetesen minden kvantummechanikai rendszerre egyaránt érvényesek. Ezekkel már az előző fejezetekben megismerkedtünk, és láttuk, hogyan jutnak érvényre a különböző egy-részecskés rendszerekben. Van azonban a kvantummechanikának egy olyan további elve, amelyik csak akkor kaphat szerepet, ha a rendszerben legalább két darab, **azonos részecske** van. Ez a **részecskeazonosság elve**. Ebben a fejezetben erről az elvről és általános következményeiről beszélünk. Természetesen egy féléves bevezető kvantummechanika előadásnak még az sem lehet célja, hogy megismertesse a tisztelt Hallgatót a legfontosabb sokrészecske-rendszerekkel. Ezek szinte az egész fizikát felölelik. Lehetne említeni az atomokat, a molekulákat, a szilárdtesteket, de a szubatomi fizikában az atommagokat, a hadronokat és rengeteg, ezekkel kapcsolatos jelenséget. Itt csak néhány olyan példát próbálok kiragadni, és részletes tárgyalásuk nélkül mintegy felvillantani, amelyek nagy mértékben igazolják a kvantummechanika helyességét. Itt kell elmondani, hogy **jelenleg nem ismerünk olyan kísérleti tényeket, amelyeknek alapján kételkednünk kellene abban, hogy a kvantummechanika helyesen írja le a mikrovilág nem relativisztikus jelenségeit.**

A kvantummechanika érvényességi köre mégis korlátozott.

1. Egyrészt, az a tapasztalat, hogy amikor a részecskék relativisztikus energiákon hatnak kölcsön, akkor **a részecskék megsemmisülhetnek, azaz sugárzássá alakulhatnak át, ill. új részecskék keletkezhetnek.** Ez nem fér bele a kvantummechanika keretei közé. Láttuk, hogy a kvantummechanikában feltesszük, hogy a hullámfüggvény normája időben állandó. Ez fejezi ki matematikailag azt a fizikai jelentést, hogy a részecskék számának egy (zárt) kvantummechanikai rendszeren belül meg kell maradnia. A kvantummechanika relativisztikus általánosítása nem bizonyult ellentmondásmentesen véghezvihetőnek. Az ilyen irányú próbálkozások azonban elvezettek a **kvantumtérelmélet** megszületéséhez, **amelyben sikerült a kvantummechanika és a speciális relativitás elmélete elveinek az ötvözése.** A kvantumtérelmélet alkalmas olyan folyamatok leírására, amelyekben részecskék keletkeznek, ill. semmisülnek meg, azaz sugárzódnak szét.
2. Más oldalról, az sem nyilvánvaló, hogy a kvantummechanika érvényes-e változatlan formában, vagy pedig általánosítható-e kézenfekvő módon arra az esetre, amikor gravitáció van jelen. Az általános relativitás elmélete értelmében a gravitáció abban nyilvánul meg, hogy a téridő görbült, nem lapos geometriájú. A kérdés tehát úgy fogalmazható át, hogy milyen a kvantumfizika görbült

téridőben. Mennyiben különbözik görbült téridőben a kvantumfizika attól, ami a nem görbült Minkowski-téridőben érvényes.

3. Végül pedig ott van a fizika egyik igazán mély kérdése, hogy a kvantumfizikai viselkedésű anyag hogyan hozza létre a tapasztalataink szerint nem kvantumos görbült téridőt. De másképp is kérdezhetünk: nem az a természetes, hogy a kvantumos anyag kvantált téridőt hoz létre, amely csak a csillagászati megfigyelési skálákon látszik klasszikus görbült téridőnek. Végső soron tehát a gravitáció is kvantált? Ezek, bizony állíthatom, korunk fizikájának legizgalmasabb kérdései.

5.1. Összetett rendszer

Tegyük fel, hogy a fizikai rendszer szabadsági fokainak száma s . Ez azt jelenti, hogy az állapotának egyértelmű megadásához szükséges és elegendő, egyidejűleg mérhető fizikai mennyiségek száma is s . Legyenek ezek a fizikai mennyiségek $\hat{F}_i$, $i = 1, 2, \dots, s$, ekkor $[\hat{F}_i, \hat{F}_j] = 0$. A fizikai mennyiségeknek ezt a rendszerét a **fizikai mennyiségek teljes rendszerének** nevezzük. A rendszernek lehetséges mikroállapotai azok az $|F_1, F_2, \dots, F_s\rangle$ állapotok, amelyek közös sajátvektorai a fizikai mennyiségek teljes rendszerében szereplő valamennyi operátornak:

$$\hat{F}_i |F_1, F_2, \dots, F_s\rangle = F_i |F_1, F_2, \dots, F_s\rangle. \quad (5.1.1)$$

A teljes Hilbert-tér az $|F_1, F_2, \dots, F_s\rangle$ állapotoknak tetszőleges lineáris kombinációit is tartalmazza. Az s szabadsági fok ezek szerint azt jelenti, hogy van a rendszernek s darab független tulajdonsága, amelyeket rendre az s darab $\hat{F}_i$ mennyiségnek az F_i értékei jellemeznek.

A fizikai mennyiségek teljes rendszerét általában sokféleképpen meg lehet választani. Válasszuk most úgy, hogy az egyes tulajdonságok az egyedi szabadsági fokokat jellemezzék: legyen a fizikai mennyiségek teljes rendszere az egyes részecskék Descartes-koordinátáinak a halmaza⁶⁴, amelyeket az egyszerűség kedvéért $\hat{x}_i$ -vel ($i = 1, 2, \dots, s$) jelölünk. Egy részecske esetén $s = 3$ és a teljes rendszer $\hat{x}_1 = \hat{x}$, $\hat{x}_2 = \hat{y}$, $\hat{x}_3 = \hat{z}$; N részecske esetén $s = 3N$ és $i \equiv (a, \alpha)$, ahol $a = 1, 2, \dots, N$ a részecske-index, $\alpha = 1, 2, 3$ a Descartes-komponensek indexe.

Felmerülhet az a kérdés, hogy az s darab független koordinátával rendelkező rendszer Hilbert-terét meg lehet-e konstruálni olyan Hilbert-terekből, amelyek olyan – hipotetikus – rendszerek Hilbert-terei, amelyeket rendre csak az s darab koordináta egyike jellemez, azaz egyetlen szabadsági fokú hipotetikus rendszerek

⁶⁴Ha a részecskéknek nemcsak térbeli, hanem belső szabadsági fokai is vannak, mint pl. a spin, akkor a koordinátákhoz hozzá kell venni pl. az egyes részecskék spinjének tetszőleges, rögzített irányú vetületét is. Az egyszerűség kedvéért most csak azt az esetet tárgyaljuk, amikor a részecskék spinje nulla és más belső szabadsági fokuk sincsen.

Hilbert-tereiből. Az i -edik szabadsági fokhoz tartozó $\mathcal{H}_i$ Hilbert-teret az $\hat{x}_i$ operátor sajátvektorai,

$$\hat{x}_i|x_i\rangle = x_i|x_i\rangle, \quad \langle x''_i|x'_i\rangle = \delta(x''_i - x'_i), \quad \hat{1}_{\mathcal{H}_i} = \int dx_i|x_i\rangle\langle x_i| \quad (5.1.2)$$

feszítik ki. Ugyanakkor a teljes $\mathcal{H}$ Hilbert-teret olyan $|x_1, x_2, \dots, x_s\rangle$ vektorok feszítik ki, amelyek valamennyi $\hat{x}_i$ operátornak közös sajátüggvényei:

$$\begin{aligned} \hat{x}_i|x_1, x_2, \dots, x_s\rangle &= x_i|x_1, x_2, \dots, x_s\rangle, \\ \langle x''_1, x''_2, \dots, x''_s|x'_1, x'_2, \dots, x'_s\rangle &= \prod_{i=1}^s \delta_{x''_i, x'_i}, \\ \hat{1}_{\mathcal{H}} &= \left(\prod_{i=1}^s \int dx_i \right) |x_1, x_2, \dots, x_s\rangle\langle x_1, x_2, \dots, x_s|. \end{aligned} \quad (5.1.3)$$

Ilyen tulajdonságok akkor elégülnek ki, ha a teljes $\mathcal{H}$ Hilbert-tér az egyes $\mathcal{H}_i$ Hilbert-tereknek úgynevezett **tenzori szorzata**:

$$\mathcal{H} = \prod_{i=1}^s \mathcal{H}_i. \quad (5.1.4)$$

A tenzori szorzattér bázisvektorait formálisan

$$|x_1, x_2, \dots, x_s\rangle = |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes \dots \otimes |x_s\rangle \quad (5.1.5)$$

tenzori szorzatalakban képzelhetjük el. A tenzori szorzás $\otimes$ műveletéről feltesszük, hogy minden tényezőjében lineáris. A tenzori szorzatteret az ilyen, szorzatalakú vektorok, mint bázis által kifeszített lineáris vektortérként értelmezzük. Ha az egyes $\mathcal{H}_i$ Hilbert-terek rendre M_i dimenziósak (pl. az x_i lehetséges értékeinek számossága kontinuum végtelen), akkor a tenzori szorzattér $M_1 M_2 \dots M_s$ dimenziós. A tenzori szorzattér tartalmaz a bázisvektorokhoz hasonló, szorzatalakú állapotokat, ún. **sze-parálható állapotokat**, és a bázisvektorok tetszőleges lineáris kombinációi között találunk nem sze-parálható, ún. **összefonódott állapotokat**. Bármely, eredetileg az egyik $\mathcal{H}_i$ Hilbert-téren értelmezett $\hat{o}_i$ operátor értelmezése kiterjeszthető a teljes $\mathcal{H}$ Hilbert-térre úgy, hogy a tetszőleges

$$|\psi\rangle = \left(\prod_{i=1}^s \int dx_i \right) \psi(x_1, x_2, \dots, x_s) |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes \dots \otimes |x_s\rangle \quad (5.1.6)$$

állapotvektorra a hatása:

$$\begin{aligned} \hat{o}|\psi\rangle &= \left(\prod_{i=1}^s \int dx_i \right) \psi(x_1, x_2, \dots, x_s) |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes \dots \otimes |x_{i-1}\rangle \otimes (\hat{o}_i|x_i\rangle) \otimes |x_{i+1}\rangle \otimes \dots \otimes |x_s\rangle \\ &= \left(\hat{1}_{\mathcal{H}_1} \otimes \hat{1}_{\mathcal{H}_2} \otimes \dots \otimes \hat{1}_{\mathcal{H}_{i-1}} \otimes \hat{o}_i \otimes \hat{1}_{\mathcal{H}_{i+1}} \otimes \dots \otimes \hat{1}_{\mathcal{H}_s} \right) |\psi\rangle, \end{aligned} \quad (5.1.7)$$

azaz formálisan, mintha egység-operátorok és az $\hat{o}_i$ operátor szorzata lenne.

A tenzori szorzattérben a tetszőleges bázisvektorok skalárszorzatát

$$\langle x''_1, x''_2, \dots, x''_s | x'_1, x'_2, \dots, x'_s \rangle = \prod_{i=1}^s \langle x''_i | x'_i \rangle = \prod_{i=1}^s \delta(x''_i - x'_i) \quad (5.1.8)$$

alakban értelmezzük, tetszőleges

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &= \left(\prod_{i=1}^s \int dx_i \right) \phi(x_1, x_2, \dots, x_s) |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes \dots \otimes |x_s\rangle, \\ |\psi\rangle &= \left(\prod_{i=1}^s \int dx_i \right) \psi(x_1, x_2, \dots, x_s) |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes \dots \otimes |x_s\rangle \end{aligned} \quad (5.1.9)$$

vektorok skaláris szorzatára pedig

$$\langle \phi | \psi \rangle = \left(\prod_{i=1}^s \int dx_i \right) \phi^*(x_1, x_2, \dots, x_s) \psi(x_1, x_2, \dots, x_s) \quad (5.1.10)$$

adódik, ha továbbra is megköveteljük a skaláris szorzat linearitását, ill. anti-linearitását, rendre a második, ill. az első tényezőjében. Összegezve, **az s szabadsági fokú rendszer Hilbert-tere tehát az egyes szabadsági fokok Hilbert-tereinek tenzori szorzata.**

Az egy-egy részecskéhez tartozó szabadsági fokokat együtt kezelve, a fentiek azt is jelentik, hogy az N részecskés rendszer **Hilbert-tere az egyes részecskék Hilbert-tereinek tenzori szorzata.** Az N -részecskés rendszer esetén a fentiek annyiban módosulnak, hogy a $\vec{r}_a$ helyzetvektor-operátorokhoz hozzá kell venni az egyes részecskék spinvetületeinek operátorait $\hat{s}_{z,a}$, hogy megkapjuk a fizikai mennyiségek teljes rendszerét⁶⁵. **Egy sokrészecskés rendszert páronként diszjunkt részrendszerek egyesítésére bonthatunk, s akkor a rendszer Hilbert-tere az egyes diszjunkt részrendszerek Hilbert-tereinek tenzori szorzata lesz.**

A továbbiakban megvizsgáljuk, milyen egy diszjunkt részekből összetett rendszer állapottere, Hamilton-operátora és stacionárius állapotai. Elegendő az A és B részek $U = A \cup B$ egyesítésével létrejött U rendszert vizsgálni. Kettőnél több részből álló rendszerekre kézenfekvő az általánosítás úgy, hogy rendre egy-egy újabb részt veszünk hozzá a rendszerhez, s minden lépést visszavezetünk két diszjunkt rész egyesítésére.

⁶⁵Feltesszük, hogy a részecskék spinje, azaz $\hat{s}_a^2$ operátoraik sajátértékei egyszer s mindenkorra adottak, nem változnak a kölcsönhatások során.

5.1.1. Független részekből álló rendszer

Az állapotokról. Vizsgáljunk olyan U rendszert, amely az egymással kölcsön nem ható, diszjunkt A és B részekből áll. A fejezet bevezetőjében elmondottak alapján az egyesített U rendszer $\mathcal{H}$ Hilbert-tere a részek $\mathcal{H}_A$ és $\mathcal{H}_B$ Hilbert-tereinek tenzori szorzata: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Annak, hogy a részrendszerek között nincsen kölcsönhatás, fontos következménye van. Léteznek egymástól függetlenül az A és a B részrendszerek „a maguk saját jogán”, mint önálló, azaz mint szabad fizikai rendszerek. A $\mathcal{H}_A$ és a $\mathcal{H}_B$ Hilbert-terek nem hipotetikus matematikai konstrukciók csupán, hanem fizikailag megvalósítható állapotokat tartalmaznak.

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

$$|\psi_U\rangle = \sum_{n,m} c_{n,m} |\phi_{A\ n}\rangle \otimes |\phi_{B\ m}\rangle \quad (5.1.11)$$

alakú, ahol $c_{n,m}$ tetszőleges komplex számok, amelyekre $\sum_{n,m} |c_{n,m}|^2 = 1$. A $|\phi_{A\ n}\rangle \otimes |\phi_{B\ m}\rangle$ állapotok ortonormált bázist alkotnak a $\mathcal{H}_U = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ tenzori szorzattérben, ha az n és m indexek egymástól függetlenül az összes lehetséges értékeiket befutják. Nyilvánvaló azonban az is, hogy tetszőleges komplex $c_{n,m}$ együttthatók esetén a $|\psi_U\rangle$ állapot általában nem írható $|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ **szeparálható** alakba. Az egyesített rendszernek vannak nem szeparálható, más néven **összefonódott állapotai**.

A szeparálható állapotokat az alábbi érdekes tulajdonság jellemzi: annak a valószínűségi amplitudója, hogy a tetszőleges $|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ szeparálható állapotban megtaláljuk a $|\phi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle$ szeparálható állapotot, azon független valószínűségi amplitudók szorzatával egyenlő, amelyek megadják, hogy a $|\psi_A\rangle$ állapotú A , ill. $|\psi_B\rangle$ állapotú B részrendszert rendre a $|\phi_A\rangle$, ill. $|\phi_B\rangle$ állapotban találjuk:

$$\langle \phi_A \phi_B | \psi_A \psi_B \rangle = \langle \phi_A | \otimes \langle \phi_B | | \psi_A \rangle \otimes | \psi_B \rangle = \langle \phi_A | \psi_A \rangle \langle \phi_B | \psi_B \rangle. \quad (5.1.12)$$

Ez azt jelenti, hogy ilyenkor az egyes részrendszerekre vonatkozó független valószínűségi amplitudók egyszerűen összeszorzódnak. Ekkor annak a valószínűsége, hogy az A részt a tetszőleges $|\phi_A\rangle \in \mathcal{H}_A$ állapotban, a B részt pedig a tetszőleges $|\phi_B\rangle \in \mathcal{H}_B$ állapotban találjuk, az egyes részekre vonatkozó találati valószínűségek szorzatai. Az tehát, hogy a nem összefonódott állapotú rendszer A , ill. B részét rendre a $|\phi_A\rangle$, ill. $|\phi_B\rangle$ állapotban találjuk egyidejűleg, valószínűségi értelemben két független esemény. Mondhatnánk, hogy természetesen ezt vártuk, hiszen nincsen kölcsönhatás az A és a B részek között. Mégis, ha a teljes rendszer összefonódott állapotban van, akkor nem tekinthető független két eseménynek, hogy A -t a $|\phi_A\rangle$, B -t pedig az $|\phi_B\rangle$ állapotban találjuk. Pl. ha $|\psi_U\rangle = c_1 |\phi_{A\ 1}\rangle \otimes |\phi_{B\ 1}\rangle + c_2 |\phi_{A\ 2}\rangle \otimes |\phi_{B\ 2}\rangle$, akkor a megfelelő valószínűségi amplitudó,

$$\begin{aligned} & \langle \phi_A | \otimes \langle \phi_B | (c_1 |\phi_{A\ 1}\rangle \otimes |\phi_{B\ 1}\rangle + c_2 |\phi_{A\ 2}\rangle \otimes |\phi_{B\ 2}\rangle) \\ &= c_1 \langle \phi_A | \phi_{A\ 1} \rangle \langle \phi_B | \phi_{B\ 1} \rangle + c_2 \langle \phi_A | \phi_{A\ 2} \rangle \langle \phi_B | \phi_{B\ 2} \rangle, \end{aligned} \quad (5.1.13)$$

két valószínűségi amplitudó összege, úgyhogy a megfelelő találati valószínűség,

$$|c_1 \langle \phi_A | \phi_{A\ 1} \rangle \langle \phi_B | \phi_{B\ 1} \rangle + c_2 \langle \phi_A | \phi_{A\ 2} \rangle \langle \phi_B | \phi_{B\ 2} \rangle|^2 \quad (5.1.14)$$

már nem a két részre vonatkozó valószínűségek szorzata, és az amplitudó két tagja interferenciát hoz létre a találati valószínűségben: megjelennek benne a

$$c_1^* c_2 \langle \phi_A | \phi_{A\ 1} \rangle^* \langle \phi_A | \phi_{A\ 2} \rangle \langle \phi_B | \phi_{B\ 1} \rangle^* \langle \phi_B | \phi_{B\ 2} \rangle + \text{c.c.} \quad (5.1.15)$$

interferencia tagok.

Hamilton-operátor. Képezzük most egy tetszőleges, szeparálható, azaz tenzori szorzat alakú állapot idő szerinti parciális deriváltját:

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t |\Psi\rangle &= i\hbar \partial_t (|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle) = i\hbar [(\partial_t |\psi\rangle) \otimes |\phi\rangle + |\psi\rangle \otimes (\partial_t |\phi\rangle)] \\ &= (\hat{H}_A |\psi\rangle) \otimes |\phi\rangle + |\psi\rangle \otimes (\hat{H}_B |\phi\rangle) = (\hat{H}_A \otimes \hat{1}_B + \hat{1}_A \otimes \hat{H}_B) |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle \\ &= (\hat{H}_A \otimes \hat{1}_B + \hat{1}_A \otimes \hat{H}_B) |\Psi\rangle \end{aligned} \quad (5.1.16)$$

adódik, miután felhasználtuk a részrendszerekre vonatkozó Schrödinger-egyenleteket. A kapott egyenlet az egyesített rendszerre vonatkozó Schrödinger-egyenlet, amelynek tetszőleges (nem csak szeparálható) $|\Psi\rangle$ állapotra fenn kell állnia. Innen azonosíthatjuk az egymással kölcsön nem ható részekből álló egyesített rendszer Hamilton-operátorát

$$\hat{H}_U = \hat{H}_A \otimes \hat{1}_B + \hat{1}_A \otimes \hat{H}_B \quad (5.1.17)$$

alakban.

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

$$i\hbar \partial_t |\Psi\rangle = (\hat{H}_A \otimes \hat{1}_B + \hat{1}_A \otimes \hat{H}_B) |\Psi\rangle \quad (5.1.18)$$

alakú. Innen következik, hogy **kölcsön nem ható részekből álló rendszer Schrödinger-egyenletének szeparálható kezdőfeltételhez tartozó megoldása szeparálható állapot marad az időbeli fejlődés során.** Természetesen összefonódott kezdeti állapothoz általában nem szeparálható megoldás tartozik.

Ha ugyanis a kezdeti állapot $|\Psi(0)\rangle = |\phi_A(0)\rangle \otimes |\phi_B(0)\rangle$, és $|\phi_A(t)\rangle$, ill. $|\phi_B(t)\rangle$ jelölik rendre a független részekre vonatkozó

$$i\hbar \partial_t |\phi_A(t)\rangle = \hat{H}_A |\phi_A(t)\rangle, \quad i\hbar \partial_t |\phi_B(t)\rangle = \hat{H}_B |\phi_B(t)\rangle \quad (5.1.19)$$

Schrödinger-egyenleteknek a $|\phi_A(0)\rangle$, ill. $|\phi_B(0)\rangle$ kezdeti feltételekhez tartozó megoldásait, akkor $|\Psi(t)\rangle = |\phi_A(t)\rangle \otimes |\phi_B(t)\rangle$ nyilvánvalóan megoldása az egyesített rendszerre vonatkozó Schrödinger-egyenletnek. Mivel adott kezdőfeltételhez a megoldás egyértelműen létezik, ezért ez a szeparálható megoldás a szeparálható kezdőfeltételhez tartozó egyetlen megoldás.

A fizikában rendszerint a rövideg kedvéért a részrendszerek állapotterei felett ható egység-operátorokat nem szoktuk explicit módon kiírni, hanem az egyesített

rendszer Hamilton-operátorát csak egyszerűen $\hat{H}_U = \hat{H}_A + \hat{H}_B$ alakban írjuk. **Kölcsön nem ható részekből álló rendszer Hamilton-operátora a részei Hamilton-operátorainak az összege.** Hasonlóan bármely más, **additív fizikai mennyiség operátora** is

$$\hat{F}_U = \hat{F}_A \otimes \hat{1}_B + \hat{1}_A \otimes \hat{F}_B \quad (5.1.20)$$

alakú.

Stacionárius állapotok. Keressük végül a kölcsön nem ható részekből álló rendszer stacionárius állapotait, azaz a

$$(\hat{H}_A \otimes \hat{1}_B + \hat{1}_A \otimes \hat{H}_B)|\Phi\rangle = E_U|\Phi\rangle \quad (5.1.21)$$

stacionárius Schrödinger-egyenlet (időtől független) $|\Phi\rangle$ megoldásait.

Tudjuk, hogy az egyes részrendszerek stacionárius állapotai rendre eleget tesznek a

$$\hat{H}_A|\phi_A n\rangle = E_A n|\phi_A n\rangle, \quad \hat{H}_B|\phi_B m\rangle = E_B m|\phi_B m\rangle \quad (5.1.22)$$

stacionárius Schrödinger-egyenleteknek, és ortonormált teljes rendszereket alkotnak rendre a $\mathcal{H}_A$, ill. a $\mathcal{H}_B$ Hilbert-terekben. Ezért az általános megoldást a $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ tenzori szorzattérben

$$|\Phi\rangle = \sum_{n,m} c_{n,m} |\phi_A n\rangle \otimes |\phi_B m\rangle \quad (5.1.23)$$

alakban kereshetjük. Behelyettesítéssel kapjuk, hogy

$$\sum_{n,m} c_{n,m} (E_A n + E_B m) |\phi_A n\rangle \otimes |\phi_B m\rangle = E_U \sum_{n,m} c_{n,m} |\phi_A n\rangle \otimes |\phi_B m\rangle. \quad (5.1.24)$$

Szorozzuk az egyenlet mindkét oldalát skalárisan a tetszőleges, rögzített $|\phi_A n'\rangle \otimes |\phi_B m'\rangle$ állapottal:

$$c_{n',m'} (E_A n' + E_B m') = E_U c_{n',m'}. \quad (5.1.25)$$

Ennek az egyenletrendszernek csak olyan megoldásai vannak, hogy minden $c_{n',m'}$ együttható nulla egyetlen egy kivételével, és annak az együtthatónak az (n, m) indexei egyúttal az összetett rendszer állapotának és energiájának is jellemző indexei, merthogy ekkor az állapot szeparálható,

$$|\phi_A n\rangle \otimes |\phi_B m\rangle \quad (5.1.26)$$

és energiája

$$E_{U(n,m)} = E_A n + E_B m. \quad (5.1.27)$$

Kölcsön nem ható részekből összetett rendszer stacionárius állapota tehát szeparálható, a részek megfelelő stacionárius állapotainak tenzori szorzata,

$$|\Phi\rangle = |\phi_A n\rangle \otimes |\phi_B m\rangle, \quad (5.1.28)$$

az energiája pedig a részek energiáinak az összege,

$$E_{U(n,m)} = E_A n + E_B m. \quad (5.1.29)$$

5.1.2. Kölcsönható részekből álló rendszer

Kölcsönható részekből álló rendszerről akkor tudunk beszélni, ha van annak értelme, hogy a részrendszerekről a köztük lévő kölcsönhatástól eltekintve beszéljünk. Ezen azt kell érteni, hogy a részek fizikai módszerekkel eltávolíthatók egymástól, aminek következtében megszűnik közöttük a kölcsönhatás, és a részek, mint aszimptotikusan szabad állapotok megvalósíthatók⁶⁶. Gondoljunk pl. arra, hogy az atomból kiszabadítjuk az atomi elektronok egyikét.

Ekkor fenntartható az, hogy a részrendszereknek van saját Hamilton-operátoruk és a Hamilton-operátor sajátvektorai által kifeszített állapotterük. Az egyesített $U = A \cup B$ rendszer állapottere a részei állapottereinek a tenzori szorzata, $\mathcal{H}_{A \cup B} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ akkor is, ha a részek között kölcsönhatás jelenik meg. A tenzori szorzattérben konstruálhatunk egy teljes ortonormált bázist úgy, hogy vesszük a $\mathcal{H}_A$, ill. a $\mathcal{H}_B$ állapotterek egy-egy ortonormált bázisát, pl. $|\psi_n\rangle \in \mathcal{H}_A$ és $|\phi_m\rangle \in \mathcal{H}_B$, majd ezekből elkészítjük az összes lehetséges szeparálható,

$$|\Psi_{n,m}\rangle \equiv |\psi_n\rangle \otimes |\phi_m\rangle \quad (5.1.30)$$

alakú állapotot. Így ortonormált bázist kaptunk, amely a teljes $\mathcal{H}_U = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ tenzori szorzatteret kifeszíti. A tenzori szorzattérben nyilvánvalóan nem csak szeparálható állapotok vannak, mert a $|\Psi_{n,m}\rangle$ bázisvektorok tetszőleges lineáris kombinációi is benne vannak. **Az $A \cup B$ egyesített rendszer tetszőleges $|\Psi\rangle$ állapota előállítható a bevezetett ortonormált bázis lineáris szuperpozíciójaként:**

$$|\Psi\rangle = \sum_{n,m} c_{n,m} |\psi_n\rangle \otimes |\phi_m\rangle, \quad (5.1.31)$$

ahol a lineárkombinációs együtthatók:

$$c_{n,m} = \langle \Psi_{n,m} | \Psi \rangle, \quad (5.1.32)$$

s az állapotvektor normálási feltételéből $\sum_{n,m} |c_{n,m}|^2 = 1$.

A részek közötti kölcsönhatás ugyan nem változtatja meg az állapotter azon matematikai tulajdonságát, hogy a részek Hilbert-tereinek tenzori szorzata, de kihatással van a Hamilton-operátor matematikai alakjára és a Schrödinger-egyenlet megoldásainak tulajdonságaira. A kölcsönható részekből álló rendszer Hamilton-operátora nem azonos a részrendszerek Hamilton-operátorainak az összegével, hanem tartalmaz egy olyan $\hat{H}_{AB}$ kölcsönhatási tagot, amely sem az A , sem a B részrendszer állapotainak $\mathcal{H}_A$, ill. $\mathcal{H}_B$ terén nem egységoperátorként hat:

$$\hat{H}_{A \cup B} = \hat{H}_A \otimes \hat{1}_B + \hat{1}_A \otimes \hat{H}_B + \hat{H}_{AB}. \quad (5.1.33)$$

⁶⁶Nem minden általános szabadsági fok képvisel olyan tulajdonságot, amely mint aszimptotikus szabad állapot megvalósítható. Pl. egy részecske x koordinátája, mint tulajdonság értelmes, de nem lehet olyan szabad állapotot létrehozni, amelynek csak az x -koordináta, mint tulajdonság az egyetlen jellemzője, anélkül, hogy a részecske (a 3-dimenziós térben) y - és z -koordinátákkal ne rendelkezne.

A $\hat{H}_{AB}$ kölcsönhatási Hamilton-operátornak köszönhetően a **Schrödinger-egyenlet szeparálható kezdőfeltételhez tartozó megoldása nem őrzi meg a szeparálható alakot**. Hasonlóképpen, a stacionárius Schrödinger-egyenlet megoldásait jelentő **stacionárius állapotok** a kölcsönhatási Hamilton-operátornak a jelenléte miatt általában **nem szeparálhatóak**.

5.1.3. N -részecskés rendszer koordináta-hullámfüggvénye

Az ábrázolás alapjául szolgáló F mennyiség(ek)nek a rendszer részecskéi helyzetvektorainak Descartes-komponenseit választjuk. Ekkor a koordináta-reprezentációban a rendszer hullámfüggvénye $3N$ -változós, azaz N darab helyzetvektortól függ:

$$\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \psi \rangle, \quad (5.1.34)$$

ahol

$$\hat{r}_a | \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N \rangle = \vec{r}_a | \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N \rangle, \quad a = 1, 2, \dots, N \quad (5.1.35)$$

A skalárszorzat

$$\begin{aligned} \langle \psi | \phi \rangle &= \int dx_1 \int dy_1 \int dz_1 \cdots \int dx_N \int dy_N \int dz_N \\ &\quad \psi^*(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_N, y_N, z_N) \phi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_N, y_N, z_N) \\ &= \int d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \psi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \end{aligned} \quad (5.1.36)$$

alakú és a hullámfüggvényre a normálási feltétel:

$$\int d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N |\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2 = 1. \quad (5.1.37)$$

A hullámfüggvény valószínűségi jelentéssel bír:

$$|\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \quad (5.1.38)$$

annak a valószínűsége, hogy egy részecskét az $\vec{r}_1$ helyzetvektorú pont körüli $d\vec{r}_1$ térfogatelemben, egy másikat az $\vec{r}_2$ helyzetvektorú pont körüli $d\vec{r}_2$ térfogatelemben, stb. és végül egyet az $\vec{r}_N$ helyzetvektorú pont körüli $d\vec{r}_N$ térfogatelemben találunk. A helyzetvektor operátorának a hatása a koordináta-hullámfüggvényre most is a helyzetvektorral történő szorzás:

$$[\hat{r}_a]_{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N} \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \vec{r}_a \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N), \quad a = 1, 2, \dots, N. \quad (5.1.39)$$

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

$$\langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle = \int d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \psi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \hat{f}_{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N} \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N). \quad (5.1.40)$$

Ha a részecskének van spinjük, akkor a spinvetület lehetséges értékeitől, mint spinváltozóktól is függ a hullámfüggvény,

$$\psi(\vec{r}_1, \sigma_{1,z}, \dots, \vec{r}_N, \sigma_{N,z}) \quad (5.1.41)$$

ahol $\sigma_{a,z}$ a $-s_a, -s_a + 1, \dots, s_a - 1, s_a$ diszkrét értékeket felvevő spinváltozó, s_a az a -adik részecske spinje, állapotok skalárszorzata

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \phi^*(\vec{r}_1, \sigma_1, \dots, \vec{r}_N, \sigma_N) \psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \dots, \vec{r}_N, \sigma_N) \quad (5.1.42)$$

és tetszőleges $\hat{f}$ operátor várható értéke

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle &= \int d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \psi^*(\vec{r}_1, \sigma_1, \dots, \vec{r}_N, \sigma_N) \hat{f}_{\vec{r}_1, \sigma_1, \dots, \vec{r}_N, \sigma_N} \psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \dots, \vec{r}_N, \sigma_N). \end{aligned} \quad (5.1.43)$$

5.1.4. N -részecskés rendszer koordináta-hullámfüggvényének valószínűségi jelentése*

Vizsgáljuk a továbbiakban az N -részecskés rendszer esetét. A koordináta-hullámfüggvény értelmezése kapcsán megtanultuk, hogy

$$\rho(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) \equiv |\langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \psi(t) \rangle|^2 \quad (5.1.1)$$

annak a valószínűségi sűrűsége, hogy a rendszert a t időpillanatban, a $\psi(t)$ állapotban olyan konfigurációban találjuk, amikor az 1-es, 2-es, stb. részecskéje rendre az $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N$ helyzetvektorú pontokban található⁶⁷. Most azt mutatjuk meg, hogy a $\rho(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t)$ valószínűségi sűrűség a

$$\partial_t \rho(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) + \sum_{a=1}^N \vec{\nabla}_a \vec{j}_a(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) = 0 \quad (5.1.2)$$

kontinuitási egyenletnek tesz eleget, ahol

$$\begin{aligned} \vec{j}_a(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) &= \frac{i\hbar}{2m_a} \left(\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) \vec{\nabla}_a \psi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) \right. \\ &\quad \left. - \psi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) \vec{\nabla}_a \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) \right) \end{aligned} \quad (5.1.3)$$

az a -adik részecske valószínűségi áramsűrűsége a $|\psi(t)\rangle$ állapotban.

⁶⁷Egyelőre feltesszük, hogy a rendszert alkotó részecskék megkülönböztethetők. A megkülönböztethetetlen részecskékből felépülő rendszerekkel később külön fogunk foglalkozni.

Írjuk fel a Schrödinger-egyenletet koordináta-reprezentációban,

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) = \hat{H}_{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N}\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t), \quad (5.1.4)$$

és ugyanennek az egyenletnek a komplex konjugáltját,

$$-i\hbar\partial_t\psi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) = \hat{H}_{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N}^*\psi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t), \quad (5.1.5)$$

és használjuk fel, hogy a Hamilton-operátor

$$\hat{H} = \sum_{a=1}^N \frac{\hat{p}_a^2}{2m_a} + V(\hat{r}_1, \dots, \hat{r}_N), \quad (5.1.6)$$

aminek koordináta-reprezentációban a

$$\hat{H}_{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N} = - \sum_{a=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_a} \vec{\nabla}_a^2 + V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad (5.1.7)$$

operátor felel meg. Ennek komplex konjugáltja önmaga, $\hat{H}_{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N}^* = \hat{H}_{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N}$. Szorozzuk a Schrödinger-egyenlet mindkét oldalát $\psi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t)$ -vel, az egyenlet komplex konjugáltjának mindkét oldalát pedig $\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t)$ -vel, majd vonjuk ki az utóbbi egyenlet megfelelő oldalait az első egyenlet megfelelő oldalaiából,

$$i\hbar[\psi^*\partial_t\psi + \psi\partial_t\psi^*] = - \sum_a \frac{\hbar^2}{2m_a} [\psi^*\vec{\nabla}_a^2\psi - \psi\vec{\nabla}_a^2\psi^*] + V[\psi^*\psi - \psi\psi^*], \quad (5.1.8)$$

ahol az áttekinthetőség kedvéért átmenetileg elhagytuk a függvények argumentumainak explicit kiírását. A hullámfüggvény értelmezése alapján

$$\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) = \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \psi(t) \rangle \quad (5.1.9)$$

és

$$|\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t)|^2 d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N = \rho(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \quad (5.1.10)$$

annak a valószínűsége, hogy a t időpillanatban az N darab részecskét olyan térbeli elrendezésben találjuk, amikor rendre egy-egy részecske tartózkodik az $\vec{r}_a$ ($a = 1, 2, \dots, N$) pontok körüli $d\vec{r}_a$ infinitezimális térfogatelemekben. Az (5.1.8) egyenlet bal oldala éppen ennek a ρ találati valószínűségnek az idő szerinti első parciális deriváltja,

$$\partial_t\rho = + \sum_{a=1}^N \frac{i\hbar}{2m_a} [\psi^*\vec{\nabla}_a^2\psi - \psi\vec{\nabla}_a^2\psi^*]. \quad (5.1.11)$$

Az egyenlet jobb oldalán alakítsuk át azonosan a szögletes zárójelben álló kifejezést:

$$\begin{aligned} & \psi^*\vec{\nabla}_a^2\psi - \psi\vec{\nabla}_a^2\psi^* \\ &= \vec{\nabla}_a \cdot (\psi^*\vec{\nabla}_a\psi) - (\vec{\nabla}_a\psi^*) \cdot (\vec{\nabla}_a\psi) - \vec{\nabla}_a \cdot (\psi\vec{\nabla}_a\psi^*) + (\vec{\nabla}_a\psi) \cdot (\vec{\nabla}_a\psi^*) \\ &= \vec{\nabla}_a \cdot [\psi^*\vec{\nabla}_a\psi - \psi\vec{\nabla}_a\psi^*]. \end{aligned} \quad (5.1.12)$$

Ezt felhasználva és a tagokat egy oldalra rendezve az (5.1.11) egyenlet az alábbi alakot ölti,

$$\partial_t\rho + \sum_{a=1}^N \vec{\nabla}_a \cdot \left(\frac{-i\hbar}{2m_a} [\psi^*\vec{\nabla}_a\psi - \psi\vec{\nabla}_a\psi^*] \right) = 0. \quad (5.1.13)$$

Vezessük be a

$$\vec{j}_a(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) = \frac{-i\hbar}{2m_a} [\psi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) \vec{\nabla}_a \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) - \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) \vec{\nabla}_a \psi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t)] \quad (5.1.14)$$

vektorokat ($a = 1, 2, \dots, N$). Ekkor a $\rho(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t)$ N -részecskés valószínűségi sűrűségre az alábbi egyenletet kapjuk az (5.1.13) egyenletből,

$$\partial_t \rho + \sum_{a=1}^N \vec{\nabla}_a \cdot \vec{j}_a = 0. \quad (5.1.15)$$

A kapott egyenlet fizikai jelentését jobban megértjük, ha egy részecske kivételével mindegyik részecske helyzetvektora szerint integráljuk az egyenlet mindkét oldalát a teljes V koordináta-térre. Tegyük fel, hogy a kiválasztott részecske, amelynek $\vec{r}_1 = \vec{r}$ helyzetvektorára nem integrálunk, az 1-es indexű. Ekkor bevezethetjük az 1-es részecske megtalálási valószínűségét jellemző **egy-részecskés valószínűségi sűrűséget**,

$$\rho_1(\vec{r}; t) = \int_V d\vec{r}_2 \int_V d\vec{r}_3 \cdots \int_V d\vec{r}_N |\psi(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; t)|^2 \quad (5.1.16)$$

és a

$$\begin{aligned} \vec{j}_1(\vec{r}; t) &= \frac{i\hbar}{2m_1} \int_V d\vec{r}_2 \int_V d\vec{r}_3 \cdots \int_V d\vec{r}_N [\psi(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; t) \\ &\quad - \psi^*(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; t) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; t)] \end{aligned} \quad (5.1.17)$$

egy-részecskés valószínűségi áramsűrűséget. Hasonló mennyiségeket értelmezhetünk minden egyes részecskére. Ekkor az (5.1.15) egyenlet az 1-es részecskére az alábbi alakot ölti:

$$\partial_t \rho_1(\vec{r}; t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_1(\vec{r}; t) + \sum_{a=2}^N \int_V d\vec{r}_2 \int_V d\vec{r}_3 \cdots \int_V d\vec{r}_N \vec{\nabla}_a \cdot \vec{j}_a(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; t) = 0. \quad (5.1.18)$$

Az egyenlet bal oldalán szereplő a indexre vonatkozó összeg minden tagjában a térfogati integrál átírható Gauss⁶⁸ tétele értelmében a V térfogatot határoló felületre vett felületi integrállá. Ha a V térfogat határai a térbeli végtelenben vannak, vagy a határokon a potenciál pozitív végtelen, akkor a határokon minden részecske valószínűségi áramsűrűségének el kell tűnnie. Ezért az egyenlet bal oldalán szereplő a -ra vonatkozó összeg minden tagja zérus⁶⁹ és az 1-es részecskére a

$$\partial_t \rho_1(\vec{r}; t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_1(\vec{r}; t) = 0 \quad (5.1.20)$$

⁶⁸Karl Friedrich Gauss (1777-1855, német) matematikus és fizikus, aki kiemelkedő munkásságot folytatott a számelmélet, az asztronómia, a geometria és az elméleti fizika területén. Amellett, hogy a fizikában is számos eredmény fűződik a nevéhez, mint pl. a legkisebb kényszer elve, a lencsék leképezésének általános elmélete, az elektrosztatika Gauss-törvénye, a Gauss-mértékrendszer, stb., számos matematikai eredményét is állandóan felhasználja a fizika, mint pl. a legkisebb négyzetek módszerét, a Gauss-eloszlást, a felületek belső geometriájára vonatkozó eredményeit, a hipergeometrikus sorokat, a Gauss-számsíkot, a faktoriális függvényt, stb. Joggal illetik a „matematika fejedelme” megtisztelő címmel.

⁶⁹Négyzetesen integrálható hullámfüggvény esetén a hullámfüggvénynek minden részecske $\vec{r}_a$ helyzetvektorától úgy kell függnie, hogy $r_a \rightarrow \infty$ esetén $\psi \sim r_a^{-\alpha}$ aszimptotikus viselkedést mutasson, ahol $\alpha > 3/2$, mert ekkor az adott helyzetvektor szerinti térfogati integrálás $R \rightarrow \infty$ felső határ esetén

$$\sim \int^R dr r^2 r^{-2\alpha} \sim R^{3-2\alpha} \rightarrow 0 \quad (5.1.19)$$

miatt konvergens eredményt ad. Ekkor viszont a valószínűségi áramsűrűség felületi integrálja $R \rightarrow \infty$ sugarú gömb felületére $\sim R^2 R^{-2\alpha-1} \sim R^{-2\alpha+1} < R^{-2} \rightarrow 0$ szerint eltűnő eredményt ad.

kontinuitási egyenletet kapjuk. Az összes többi részecskére is hasonló alakú kontinuitási egyenletet lehet levezetni.

A kontinuitási egyenlet értelme világosabbá válik, ha átírjuk az egyenletet **integrális alakba**. Integráljuk ezért az egyenlet mindkét oldalát egy tetszőleges V térfogatra, majd a valószínűségi áramsűrűség divergenciájának térfogati integrálját írjuk át a Gauss-tétel segítségével a V térfogatot határoló F felületre vett integrállá,

$$\frac{d}{dt} \int_V dV \rho_1(\vec{r}; t) = - \oint_F df \vec{n} \cdot \vec{j}_1(\vec{r}; t). \quad (5.1.21)$$

Ez az egyenlet azt fejezi ki, hogy **annak a**

$$w = \int_V dV \rho_1(\vec{r}; t) \quad (5.1.22)$$

valószínűsége, hogy egy részecskét a V térfogatban találunk, azért változik csak időben, mert bizonyos valószínűséggel a részecske ki- és, ill. vagy beáramlik a térfogatot határoló F felületen keresztül. Ha a V térfogaton belül dw -vel megváltozik a találati valószínűség, akkor a V térfogaton kívül $-dw$ -vel változik meg úgy, hogy a valószínűség „átáramlik” a V térfogatot határoló F zárt felületen. Másképpen ez azt jelenti, hogy **találati valószínűség nem keletkezik a V térfogaton belül a „semmiből” és nem is tűnik el „nyomtalanul”.** **A kontinuitási egyenlet a találati valószínűség lokális megmaradását fejezi ki.** Másrészt, ha az (5.1.21) kontinuitási egyenlet integrális alakjában V a teljes tér, azaz az egész térre integrálunk, akkor a

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho_1(\vec{r}; t) = 0 \quad (5.1.23)$$

globális megmaradási törvényt találjuk: annak a valószínűsége, hogy a részecskét a térben valahol megtaláljuk, nem változik az idő függvényében. Tudjuk, hogy a fizikai állapotok úgy vannak normálva, hogy **ez a valószínűség a bizonyos esemény valószínűsége, azaz**

$$\int_V \rho_1(\vec{r}; t) = 1. \quad (5.1.24)$$

A térben valahol bizonyosan ott van a részecske. Ilyen elméletet „alkottunk”, amelyben ez igaz, azaz olyat, ami olyan fizikai rendszerek leírására alkalmas, amelyekben a részecskék nem keletkeznek és nem tűnnek el. **A kvantummechanika tehát olyan elmélet, amelyben a részecskék megmaradnak.** Ez természetesen nem azt jelenti, hogy a belső szerkezettel rendelkező objektumok nem eshetnek szét alkatrészeikre, az őket felépítő részecskékre.

Formailag a kontinuitási egyenlet differenciális, ill. integrális alakja pontosan olyan, mint rendre a klasszikus elektrodinamikában az elektromos töltés megmaradását kifejező kontinuitási egyenlet megfelelő alakjai.

Ha a rendszer egyetlen részecskét tartalmaz, azaz $N = 1$, akkor

$$\begin{aligned} \rho_1(\vec{r}; t) &= |\psi(\vec{r}; t)|^2, \\ \vec{j}(\vec{r}; t) &= \frac{i\hbar}{2m} [\psi(\vec{r}; t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}; t) - \psi^*(\vec{r}; t) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}; t)]. \end{aligned} \quad (5.1.25)$$

5.1.5. A teljes impulzus

Részecskerendszer teljes impulzusának operátorát annak alapján definiálhatjuk, hogy megkeressük, mi az az operátor, ami a részecskerendszer koordináta-hullámfüggvényének megváltozását generálja a rendszer $\vec{b}$ vektorral történő infinitezimális eltolása

során. Legyen a K inerciarendszerben a rendszer hullámfüggvénye $\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$. Legyen K' a térben eltoló koordináta-rendszer, amelyben a részecskék $\vec{r}'_a$ helyzetvektoraira $\vec{r}_a = \vec{r}'_a + \vec{b}$, és legyen K' -ben a rendszer hullámfüggvénye $\psi'(\vec{r}'_1, \dots, \vec{r}'_N)$. A két hullámfüggvény ugyanazt a fizikai állapotot írja le, ezért a tér azonos pontjában azonos az értékük:

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) &= \psi'(\vec{r}'_1, \dots, \vec{r}'_N) = \psi'(\vec{r}_1 - \vec{b}, \dots, \vec{r}_N - \vec{b}) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(- \sum_{a=1}^N \vec{b} \cdot \vec{\nabla}_a \right)^n \psi'(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \\ &= e^{-\sum_{a=1}^N \vec{b} \cdot \vec{\nabla}_a} \psi'(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)\end{aligned}\quad (5.1.1)$$

A jobb oldalon az operátor kitevőjében explicit módon megjeleníthetjük az egyes részecskék impulzusának $\hat{p}_a$ operátorait,

$$\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_{a=1}^N \vec{b} \cdot \hat{p}_a} \psi'(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad (5.1.2)$$

ahonnan

$$\psi'(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \hat{U}(\vec{b}) \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad (5.1.3)$$

és

$$\hat{U}(\vec{b}) = e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{a=1}^N \vec{b} \cdot \hat{p}_a} \quad (5.1.4)$$

pedig a térbeli eltolás operátora. Mivel az impulzus-operátorok önadjungáltak, azért az összegük is az, úgyhogy a térbeli eltolás $\hat{U}(\vec{b})$ operátora unitér, $\hat{U}^{-1}(\vec{b}) = \hat{U}^\dagger(\vec{b})$. Infinitesimalis eltolás esetén

$$\hat{U}(\vec{b}) = \hat{1} + \frac{i}{\hbar} \sum_{a=1}^N \vec{b} \cdot \hat{p}_a + \mathcal{O}(b^2), \quad (5.1.5)$$

ami azt jelenti, hogy az infinitesimalis eltolások generátora a

$$\hat{P} = \sum_{a=1}^N \hat{p}_a \quad (5.1.6)$$

operátor, amelynek segítségével előállíthatjuk a véges eltolások operátorát,

$$\hat{U}(\vec{b}) = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{b} \cdot \hat{P}}. \quad (5.1.7)$$

Vizsgáljuk most meg, hogyan transzformálódik a $\hat{H}$ Hamilton-operátor térbeli eltolás során. A K rendszerben a Schrödinger-egyenlet

$$i\hbar \partial_t \psi = \hat{H} \psi, \quad (5.1.8)$$

a K' rendszerben pedig

$$i\hbar \partial_t \psi' = \hat{H}' \psi'. \quad (5.1.9)$$

Az utóbbi egyenletbe helyettesítsük be $\psi' = \hat{U}(\vec{b})\psi$ -t,

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t[\hat{U}(\vec{b})\psi] &= \hat{H}'\hat{U}(\vec{b})\psi, \\ \hat{U}(\vec{b})i\hbar\partial_t\psi &= \hat{H}'\hat{U}(\vec{b})\psi, \\ i\hbar\partial_t\psi &= \hat{U}^\dagger(\vec{b})\hat{H}'\hat{U}(\vec{b})\psi. \end{aligned} \quad (5.1.10)$$

Hasonlítsuk ezt össze a K rendszerben érvényes Schrödinger-egyenlettel, s akkor látjuk, hogy

$$\hat{H} = \hat{U}^\dagger(\vec{b})\hat{H}'\hat{U}(\vec{b}). \quad (5.1.11)$$

ill.

$$\hat{H}' = \hat{U}(\vec{b})\hat{H}\hat{U}^\dagger(\vec{b}). \quad (5.1.12)$$

Vegyünk most olyan fizikai rendszert, amelyik invariáns a térbeli eltolásokkal szemben. Egy ilyen rendszer esetén $\hat{H}' = \hat{H}$, aminek az a következménye, hogy a Hamilton-operátor felcserélhető a térbeli eltolások operátoraival,

$$[\hat{H}, \hat{U}(\vec{b})] = 0 \quad (5.1.13)$$

tetszőleges $\vec{b}$ vektor esetén. Ez viszont azt jelenti, hogy a Hamilton-operátor felcserélhető a térbeli eltolások $\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z$ generátoraival,

$$[\hat{H}, \hat{\vec{P}}] = 0. \quad (5.1.14)$$

Ennek az a következménye, hogy a $\hat{\vec{P}}$ önadjungált operátor megmaradó fizikai mennyiség operátora, amely mennyiség akkor és csak akkor marad meg, ha a rendszer invariáns a térbeli eltolásokkal szemben. Ezt a fizikai mennyiséget ezért a rendszer teljes impulzusának kell neveznünk:

$$\hat{\vec{P}} = \sum_{a=1}^N \hat{\vec{p}}_a, \quad (5.1.15)$$

ahol

$$\hat{\vec{p}}_a = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_a} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_a = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x_a}, \frac{\partial}{\partial y_a}, \frac{\partial}{\partial z_a} \right) \quad (5.1.16)$$

az a -adik részecske impulzusának operátora.

A részecskerendszer teljes impulzusának operátora tehát az egyes részecskék impulzusoperátorainak vektori összege. Ez teljesen analóg azzal a klasszikus fizikai szabállyal, hogy a rendszer teljes impulzusának vektora az egyes részecskék impulzusvektorainak vektori összege.

5.1.6. Az eredő pályaimpulzusmomentum

Ha megvizsgáljuk, hogy mi az az operátor, amely egy N -részecskés rendszer⁷⁰ hullámfüggvényének megváltozását generálja a koordinátarendszer infinitezimális, térbeli elforgatása során, akkor azt kapjuk, hogy ez az operátor az egyes részecskék pályaimpulzusmomentum-operátorainak vektori összegzésével kapott operátor.

Valóban, legyen a rendszer hullámfüggvénye a K inerciarendszerben $\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ és Hamilton-operátora $\hat{H}$, a K -hoz képest elforgatott K' rendszerben pedig a hullámfüggvény és a Hamilton-operátor rendre $\psi'(\vec{r}'_1, \dots, \vec{r}'_N)$ és H' . Legyen a K' rendszer az, amelyet a K rendszer $\vec{n}$ irány ($\vec{n}^2 = 1$) körüli $\delta\varphi$ infinitezimális elforgatásával kapunk. Ekkor $\vec{r}'_a = \vec{r}_a - \vec{n}\delta\varphi \times \vec{r}_a$ ($a = 1, 2, \dots, N$), és ugyanazt a fizikai állapotot írják le K -ban ill. K' -ben a megfelelő hullámfüggvények, tehát

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) &= \psi'(\vec{r}'_1, \dots, \vec{r}'_N) = \psi'(\vec{r}_1 - \vec{n}\delta\varphi \times \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N - \vec{n}\delta\varphi \times \vec{r}_N) \\ &= \psi'(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) - \delta\varphi \sum_{a=1}^N (\vec{n} \times \vec{r}_a) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_a} \psi'(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \\ &= \psi'(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) - \delta\varphi \vec{n} \cdot \sum_{a=1}^N (\vec{r}_a \times \vec{\nabla}_{\vec{r}_a}) \psi'(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N),\end{aligned}\quad (5.1.17)$$

ahonnan a hullámfüggvény az elforgatott K' rendszerben

$$\psi'(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) + \delta\varphi \vec{n} \cdot \sum_{a=1}^N (\vec{r}_a \times \vec{\nabla}_{\vec{r}_a}) \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad (5.1.18)$$

$\mathcal{O}(\delta\varphi)$ pontossággal. Ez azt jelenti, hogy a hullámfüggvény infinitezimális megváltozása a koordinátarendszer térbeli elforgatása miatt

$$\begin{aligned}\delta\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) &= \psi'(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) - \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \\ &= \delta\varphi \vec{n} \cdot \sum_{a=1}^N (\vec{r}_a \times \vec{\nabla}_{\vec{r}_a}) \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \\ &= \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \vec{n} \cdot \sum_{a=1}^N (\vec{r}_a \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}_a}) \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \\ &= \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \vec{n} \cdot \sum_{a=1}^N \hat{\vec{\ell}}_a \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \\ &= \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \vec{n} \cdot \hat{\vec{L}} \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N).\end{aligned}\quad (5.1.19)$$

Ez azt mutatja, hogy a térbeli elforgatás generátora a

$$\hat{\vec{L}} = \sum_{a=1}^N \hat{\vec{\ell}}_a \quad (5.1.20)$$

önadjungált operátor.

⁷⁰Ismét zérus spinű részecskékből álló rendszerről van szó.

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:

$$\hat{\vec{L}} = \sum_{a=1}^N \hat{\vec{\ell}}_a. \quad (5.1.21)$$

Az egyes pályaimpulzusmomentum-komponensek operátorai a

$$[\hat{\ell}_{a,j}, \hat{\ell}_{b,k}] = i\hbar \delta_{a,b} \epsilon_{j,k,l} \hat{\ell}_{a,l} \quad (5.1.22)$$

csererelációknak tesznek eleget, ugyanis bármely két, különböző részecskékhez tartozó pályaimpulzusmomentum-komponens operátora kommutál, hiszen egyik az egyik, a másik a másik részecske állapotainak terében hat⁷¹. Ezeknek a csere-relációknak a segítségével könnyű belátni, hogy az eredő pályaimpulzusmomentum komponensei ugyanolyan alakú csererelációknak tesznek eleget, mint egy részecske pályaimpulzusmomentumának komponensei:

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \epsilon_{j,k,l} \hat{L}_l. \quad (5.1.23)$$

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

$$[\hat{L}_j, \hat{\vec{L}}^2] = 0. \quad (5.1.24)$$

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. Ezekszerint **az N darab (zérus spinű) részecskéből álló rendszer impulzusmomentumának sajátállapotai az eredő pályaimpulzusmomentum négyzetének $\hbar^2 L(L+1)$ sajátértékeivel és az eredő pályaimpulzusmomentum tetszőlegesen felvett z -tengely irányába eső $\hat{L}_z$ vetületének $M\hbar$ sajátértékeivel jellemezhetők, ahol $L = 0, 1, 2, \dots$ lehet és az egyes L kvantumszámokhoz tartozó állapotok alterei $(2L+1)$ dimenziósak, amelyben az $M = -L, -L+1, \dots, 0, \dots, L-1, L$ vetülethez tartozó állapotok egy ortonormált bázist alkotnak.**

Meg lehetne mutatni, hogy az $\vec{n}$ irány körüli véges α szögű elforgatás esetén a hullámfüggvény transzformációja

$$\psi'(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \hat{U}(\vec{n}, \alpha) \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N), \quad (5.1.25)$$

ahol a transzformációt az

$$\hat{U}(\vec{n}, \alpha) = e^{\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \hat{\vec{L}}} \quad (5.1.26)$$

⁷¹Az N -részecskés rendszer Hilbert-tere az egyes részecskék Hilbert-tereinek tenzori szorzata.

unitér operátor írja le. Hasonlóan, mint a térbeli eltolások esetén, most is beláthatjuk, hogy a Hamilton-operátor transzformációja

$$\hat{H}' = \hat{U}(\vec{n}, \alpha) \hat{H} \hat{U}^\dagger(\vec{n}, \alpha). \quad (5.1.27)$$

Forgásszimmetrikus fizikai rendszer esetén $\hat{H}' = \hat{H}$, ami azt jelenti, hogy a Hamilton-operátor felcserélhető a térbeli elforgatások $\hat{U}(\vec{n}, \alpha)$ operátoraival,

$$[\hat{H}, \hat{U}(\vec{n}, \alpha)] = 0 \quad (5.1.28)$$

tetszőleges $\vec{n}$ irány és $\alpha \in [0, 2\pi]$ szög esetén. Ez akkor és csak akkor lehetséges, ha a Hamilton-operátor kommutál az eredő pályaimpulzusmomentum $\hat{\vec{L}}$ operátorának valamennyi Descartes-komponensével,

$$[\hat{H}, \hat{L}_i] = 0, \quad (i = x, y, z), \quad (5.1.29)$$

amiből az is következik, hogy a Hamilton-operátor az eredő pályaimpulzusmomentum négyzetének operátorával is kommutál,

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0. \quad (5.1.30)$$

A (5.1.29) relációk fennállása azt is jelenti, hogy forgásszimmetrikus (és zérus spinű részecskékből álló) rendszer esetén az $\hat{\vec{L}}$ operátor, azaz a térbeli elforgatások generátora megmaradó fizikai mennyiség operátora, azaz Descartes-komponenseinek várható értéke időben állandó. Megmaradása a forgásszimmetria következménye, ezért **az $\hat{\vec{L}}$ operátort valóban a fizikai rendszer eredő pályaimpulzusmomentumának nevezhetjük.**

Ugyanakkor tudjuk, hogy az eredő pályaimpulzusmomentum komponenseinek egymással páronként képezett kommutátorai rendre kifejezhetők, mint a harmadik komponens lineáris kifejezése:

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{i,j,k}\hat{L}_k. \quad (5.1.31)$$

Egyidejűleg tehát csak a $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ és $\hat{L}_z$ operátoroknak lehet jól meghatározott értéke, azaz a forgásszimmetrikus (zérus spinű részecskékből felépített) rendszer stacionárius állapotait a megfelelő E , L , M_L kvantumszámokkal lehet jellemezni. A $\hat{H}$ Hamilton-operátor azonban a forgásszimmetria miatt nem függhet külön-külön tetszőlegesen az $\hat{L}_i$ Descartes-komponensektől, hanem azoknak csak a forgásszimmetrikus $\hat{L}^2$ kifejezésétől. Ezért az energiasajátértékek általában L -től függenek⁷², E_L , de az egyes E_L energiaszintek az eredő pályaimpulzusmomentum $\hat{L}_z$ vetületének M_L sajátértéke szerint $(2L + 1)$ -szeresen elfajultak, azaz $(2L + 1)$ -dimenziós multiplettek.

5.1.7. A pályaimpulzusmomentumok összeadása

A gyakorlat számára az az eset érdekes, amikor tudjuk, hogy a rendszert adott pályaimpulzusmomentumú állapotokban levő részecskék építik fel. Ekkor az N -részecskés rendszer a fentebb leírt teljes állapottérnek egy alterére van korlátozva. Melyik ez?

⁷²Előfordulhat, hogy a rendszer további szimmetriával is rendelkezik és ezért az energiaszintjei az L lehetséges értékei szerint is elfajultak. Ilyen eset a H-atom energiaszintjeinek pályaimpulzusmomentum szerinti elfajulása.

A megfelelő altér megkeresését 2 részecske, azaz 2 impulzusmomentum összeadásának példáján már az impulzusmomentumok összeadásáról szóló fejezetben általános alakban megadtuk. (A fejezetben $\hat{j}_a$ -t rendre $\hat{\ell}_a$ -val, $\hat{J}$ -t $\hat{L}$ -lel kell helyettesíteni, ill. ezen operátorok sajátértékeit a megfelelő operátorok sajátértékeivel kell helyettesíteni.)

Ismétlésképpen részletesen leírjuk az általános összeadási szabály alkalmazását. Legyenek az egyes részecskék pályaimpulzusmomentumai $\hat{\ell}_a$ ($a = 1, 2$), az $\hat{\ell}_a^2$, $\hat{\ell}_a z$ operátor-párok közös sajátvektorai rendre $|\ell_a, m_a\rangle$,

$$\hat{\ell}_a^2 |\ell_a, m_a\rangle = \hbar^2 \ell_a(\ell_a + 1) |\ell_a, m_a\rangle, \quad \hat{\ell}_a z |\ell_a, m_a\rangle = \hbar m_a |\ell_a, m_a\rangle \quad (a = 1, 2). \quad (5.1.1)$$

Legyen az egyik részecske az ℓ_1 -hez tartozó $|\ell_1, m_1\rangle$ állapotok valamelyikében, a másik részecske az ℓ_2 -höz tartozó $|\ell_2, m_2\rangle$ állapotok valamelyikében. Nyilvánvalóan az $[\hat{\ell}_{a,i}, \hat{\ell}_{b,j}] = i\hbar \epsilon_{i,j,k} \hat{\ell}_{a,k} \delta_{a,b}$ kommutátor-relációk állnak fenn, hiszen az egyes részecskék pályaimpulzusmomentum-operátorainak Descartes-komponenseire a szokásos csererelációk érvényesek, a különböző részecskék pályaimpulzusmomentumának komponensei pedig egymással felcserélhetők. Következésképpen $[\hat{\ell}_a^2, \hat{\ell}_b^2] = 0$, $[\hat{\ell}_a^2, \hat{\ell}_{b,z}] = 0$ csererelációk is fennállnak. Mindez azt jelenti, hogy a 2-részecskés rendszer impulzusmomentum-állapotainak egyidejűleg mérhető jellemzői $\hat{\ell}_1^2$, $\hat{\ell}_2^2$, $\hat{\ell}_{1,z}$ és $\hat{\ell}_{2,z}$. Az impulzusmomentum-állapotok teljes rendszere tehát az $|\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle$ állapotok teljes rendszere, amely $(2\ell_1 + 1)(2\ell_2 + 1)$ darab független állapotot tartalmaz, s ezekre fennállnak az

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_1^2 |\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle &= \hbar^2 \ell_1(\ell_1 + 1) |\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle, \\ \hat{\ell}_2^2 |\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle &= \hbar^2 \ell_2(\ell_2 + 1) |\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle, \\ \hat{\ell}_{1,z} |\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle &= \hbar m_1 |\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle, \\ \hat{\ell}_{2,z} |\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle &= \hbar m_2 |\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle. \end{aligned} \quad (5.1.2)$$

Ezek a bázisállapotok ortonormált teljes rendszert alkotnak a 2-részecskés rendszer impulzusmomentum-állapotainak $(2\ell_1 + 1)(2\ell_2 + 1)$ dimenziós Hilbert-terében.

Vizsgáljuk most meg azt, hogy milyen csererelációk állnak fenn az eredő $\hat{L} = \hat{\ell}_1 + \hat{\ell}_2$ pályaimpulzusmomentum négyzetének $\hat{L}^2$ operátora, a z -irányú vetületének $\hat{L}_z$ operátora és az egyes részecskék $\hat{\ell}_a^2$ és $\hat{\ell}_{a,z}$ operátorai között. Mivel $[\hat{\ell}_{a,i}, \hat{\ell}_b^2] = 0$, azért

$$[\hat{\ell}_a^2, \hat{L}^2] = 0, \quad (5.1.3)$$

azaz $\hat{L}^2$, $\hat{\ell}_1^2$ és $\hat{\ell}_2^2$ egyidejűleg mérhetők, azaz az eredő pályaimpulzusmomentum L és az egyes részecskék ℓ_1 és ℓ_2 impulzusmomentuma egyidejűleg lehet jól definiált. Ugyanakkor tudjuk, hogy

$$[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0, \quad (5.1.4)$$

és könnyen beláthatjuk, hogy

$$[\hat{L}_z, \hat{\ell}_{a,z}] = [\hat{\ell}_{1,z} + \hat{\ell}_{2,z}, \hat{\ell}_{a,z}] = 0, \quad (5.1.5)$$

ami azt jelenti, hogy L , ℓ_1 és ℓ_2 mellett M is egyidejűleg jól meghatározott lehet. Arról viszont könnyen meggyőződhetünk, hogy $[\hat{\ell}_{a,z}, \hat{L}^2] \neq 0$, és ezért az L , ℓ_1 , ℓ_2 és M kvantumszámokkal jellemzett állapotokban m_1 és m_2 nem lehet jól meghatározott. Az csererelációk tehát arra utalnak, hogy

az impulzusmomentum-állapotok terében létezik egy másik bázis is, amelyhez tartozó állapotokat az L , ℓ_1 , ℓ_2 és M kvantumszámok együttesen jellemeznek. Jelöljük ezeket az állapotokat

$$|L, M, \ell_1, \ell_2\rangle \quad (5.1.6)$$

ket-vektorokkal. Ezek kielégítik az alábbi sajátérték-egyenleteket:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 |L, M, \ell_1, \ell_2\rangle &= \hbar^2 L(L+1) |L, M, \ell_1, \ell_2\rangle, \\ \hat{L}_z |L, M, \ell_1, \ell_2\rangle &= \hbar M |L, M, \ell_1, \ell_2\rangle, \\ \hat{\ell}_1^2 |L, M, \ell_1, \ell_2\rangle &= \hbar^2 \ell_1(\ell_1+1) |L, M, \ell_1, \ell_2\rangle, \\ \hat{\ell}_2^2 |L, M, \ell_1, \ell_2\rangle &= \hbar^2 \ell_2(\ell_2+1) |L, M, \ell_1, \ell_2\rangle. \end{aligned} \quad (5.1.7)$$

Viszont ezek az állapotok nem sajátvektorai az $\hat{\ell}_{1,z}$ és $\hat{\ell}_{2,z}$ vetületeknek.

A 2-részecskés rendszer eredő pályaimpulzusmomentumának lehetséges értékei:

$$L = |\ell_1 - \ell_2|, |\ell_1 - \ell_2| + 1, \dots, \ell_1 + \ell_2 - 1, \ell_1 + \ell_2, \quad (5.1.8)$$

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

$$M = -L, -L+1, \dots, 0, \dots, L-1, L. \quad (5.1.9)$$

Vegyük észre, hogy ez pontosan

$$\sum_{L=|\ell_1-\ell_2|}^{\ell_1+\ell_2} (2L+1) = (2\ell_1+1)(2\ell_2+1) \quad (5.1.10)$$

darab páronként ortogonális $|L, M, \ell_1, \ell_2\rangle$ bázisállapot létezését jelenti. Ez pontosan ugyanannyi bázisállapot, mint ahány páronként ortogonális bázisállapot található a $|\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle$ bázisban. Ez azt jelenti, hogy **a 2-részecskés rendszer szóbanforgó alterében az adott L, M kvantumszámokkal jellemzett $|L, M; \ell_1, \ell_2\rangle$ állapotok ugyanúgy meghatároznak egy bázist, mint az $|\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle$ szorzatalakú állapotok.** Ezért létezik olyan bázistranszformáció, amelyik az egyik bázist átviszi a másikba:

$$|L, M; \ell_1, \ell_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} (LM|\ell_1 m_1 \ell_2 m_2) |\ell_1, m_1\rangle \otimes |\ell_2, m_2\rangle, \quad (5.1.11)$$

ahol a **bázistranszformáció mátrixának elemei az ún. $(LM|\ell_1 m_1 \ell_2 m_2)$ Clebsch-Gordan-együtthatók.**

5.2. A teljes impulzusmomentum

Megtanultuk, hogy az eredő pályaimpulzusmomentum operátora a hullámfüggvény transzformációját generálja a koordináta-rendszer térbeli elforgatásai során, ha olyan fizikai rendszer hullámfüggvényéről van szó, amelynek részecskéi $s = 0$ spinűek. Feltehetjük azt a kérdést, hogy mi az az operátor, amelyik olyan fizikai rendszer hullámfüggvényének transzformációját generálja a koordináta-rendszer térbeli elforgatásai során, amelynek részecskéi zérustól különböző spinűek. A matematika csoportelmélet nevű ága erre azt a választ adja, hogy a térbeli elforgatások generátorai olyan $\hat{J}_i$ ($i = 1, 2, 3$) önadjungált operátorok, amelyek a

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \epsilon_{i,j,k} \hat{J}_k, \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_i] = 0 \quad (5.2.1)$$

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

$$\hat{J}^2 = \sum_{i=1}^3 \hat{J}_i^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2. \quad (5.2.2)$$

A fenti összefüggések tekintetében teljesen mindegy, hogy egyetlen részecske vagy egy részecskékből bonyolult módon felépülő fizikai rendszer hullámfüggvényének transzformációját meghatározó generátorokról beszélünk.

Hasonlóan, mint egyetlen részecske esetén beláthatjuk, hogy a fizikai rendszer elforgatási szimmetriájának szükséges és elégséges feltétele, hogy a $\hat{J}_i$ generátorok felcserélhetők legyenek a Hamilton-operátorral. Ekkor a $\hat{J}^2$ operátor is felcserélhető a Hamilton-operátorral. Ebből következik, hogy a forgásszimmetria következménye, hogy a $\hat{J}_i$ generátorok és velük együtt a $\hat{J}^2$ operátor is megmaradó fizikai mennyiségek operátorai. Azt a fizikai mennyiséget, amely a térbeli elforgatási szimmetria következtében megmarad, a fizikai rendszer teljes impulzusmomentumának nevezzük.

Hasonlóan, mint ahogy beláttuk, hogy egy fizikai rendszer eredő pályaimpulzusmomentumának operátora az egyes részecskék pályaimpulzusmomentum-operátorainak vektori összege, ugyanúgy a fizikai rendszer teljes impulzusmomentumának $\hat{\vec{J}}$ operátora az egyes részecskék $\hat{\vec{j}}_a$ ($a = 1, 2, \dots, N$) teljes impulzusmomentuma operátorainak vektori összege:

$$\hat{\vec{J}} = \sum_{a=1}^N \hat{\vec{j}}_a, \quad (5.2.3)$$

ahol az egyes részecskék teljes impulzusmomentumának operátora a megfelelő pályaimpulzusmomentum-operátor és spin-operátor összege,

$$\hat{\vec{j}}_a = \hat{\vec{\ell}}_a + \hat{\vec{s}}_a. \quad (5.2.4)$$

Ha bevezetjük a fizikai rendszer eredő pályaimpulzusmomentumának

$$\hat{\vec{L}} = \sum_{a=1}^N \hat{\vec{\ell}}_a \quad (5.2.5)$$

operátorát és eredő spinjének

$$\hat{\vec{S}} = \sum_{a=1}^N \hat{\vec{s}}_a \quad (5.2.6)$$

operátorát, akkor írhatjuk, hogy a fizikai rendszer teljes impulzusmomentumának operátora a rendszer eredő pályaimpulzusmomentuma és eredő spinje operátorának összege:

$$\hat{\vec{J}} = \sum_{a=1}^N \hat{\vec{j}}_a = \sum_{a=1}^N (\hat{\vec{\ell}}_a + \hat{\vec{s}}_a) = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}. \quad (5.2.7)$$

Itt az egy-részecskés operátorok az alábbi csererelációkat elégítik ki,

$$\begin{aligned}
[\hat{j}_{ai}, \hat{j}_{bj}] &= i\hbar\delta_{a,b}\epsilon_{i,j,k}\hat{j}_{ak}, & [\hat{\ell}_{ai}, \hat{\ell}_{bj}] &= i\hbar\delta_{a,b}\epsilon_{i,j,k}\hat{\ell}_{ak}, & [\hat{s}_{ai}, \hat{s}_{bj}] &= i\hbar\delta_{a,b}\epsilon_{i,j,k}\hat{s}_{ak}, \\
[\hat{j}_a^2, \hat{j}_{bi}] &= 0, & [\hat{\ell}_a^2, \hat{\ell}_{bi}] &= 0, & [\hat{s}_a^2, \hat{s}_{bi}] &= 0 \\
[\hat{j}_a^2, \hat{\ell}_b^2] &= 0, & [\hat{j}_a^2, \hat{s}_b^2] &= 0, & [\hat{\ell}_a^2, \hat{s}_b^2] &= 0, \\
[\hat{j}_a^2, \hat{\ell}_{az}] &\neq 0, & [\hat{j}_a^2, \hat{s}_{az}] &\neq 0, & [\hat{\ell}_{az}, \hat{s}_{bz}] &= 0.
\end{aligned} \tag{5.2.8}$$

Az impulzusmomentum-állapotok terében létezik egy szeparált egy-részecske állapotok tenzori szorzatából álló bázis:

$$\begin{aligned}
|\ell_1, m_1, s_1, m_{s1}, \dots, \ell_N, m_N, s_N, m_{sN}\rangle &= |\ell_1, m_1\rangle \otimes |s_1, m_{s1}\rangle \otimes \dots \otimes |\ell_N, m_N\rangle \\
&\otimes |s_N, m_{sN}\rangle.
\end{aligned} \tag{5.2.9}$$

Az egy-részecskés operátorok csererelációi alapján, mint azt korábbi tanulmányainkból tudjuk egy másik lehetséges bázis, amikor az egyes részecskék j_a teljes impulzusmomentumát, a részecskék teljes impulzusmomentumának m_{j_a} vetületét, valamint a részecskék ℓ_a pályamomentumát és s_a spinjét adjuk meg:

$$|j_1, m_{j1}, \ell_1, s_1, \dots, j_N, m_{jN}, \ell_N, s_N\rangle = |j_1, m_{j1}, \ell_1, s_1\rangle \otimes \dots \otimes |j_N, m_{jN}, \ell_N, s_N\rangle, \tag{5.2.10}$$

ahol

$$|j_a, m_{j_a}, \ell_a, s_a\rangle = \sum_{m_a, m_{sa}} (j_a m_{j_a} | \ell_a m_a s_a m_{sa}) | \ell_a, m_a \rangle \otimes | s_a, m_{sa} \rangle. \tag{5.2.11}$$

A továbbiakban azzal foglalkozunk, hogy hogyan lehet az előbbi, egy-részecskés jellemzők tekintetében szeparált bázisok helyett olyan bázisokat találni, amelyek a teljes impulzusmomentum négyzetének és vetületének, azaz rendre $\hat{J}^2$ -nek és $\hat{J}_z$ -nek sajátállapotai. Erre kétféle lehetőséget érdemes megtárgyalni:

1. *A $j-j$ -csatolás.* Ennek lényege, hogy az impulzusmomentumok összeadásának szabályát alkalmazva az egyes részecskék teljes impulzusmomentumait egymást követő lépésekben összecsatoljuk, először $\hat{j}_1$ -et és $\hat{j}_2$ -t $\hat{j}_{1,2}$ -vé, majd $\hat{j}_{1,2}$ -t és $\hat{j}_3$ -at $\hat{j}_{1,2,3}$ -má, stb. míg végül az utolsó részecske teljes impulzusmomentumát is összecsatolva az előzőek eredőjével, megkapjuk a $\hat{J}$ teljes impulzusmomentumot. A $j-j$ -csatolással kapott bázisállapotok használata akkor célszerű, ha az egyes részecskék pályamomentuma és spinje között a kölcsönhatás sokkal erősebb, mint a különböző részecskék teljes impulzusmomentumai közötti kölcsönhatás. Ekkor az egyes részecskék teljes impulzusmomentuma négyzetének operátorai felcserélhetők vagy „majdnem felcserélhetők” a rendszer Hamilton-operátorával, azaz a Hamilton-operátor mátrixa a $j-j$ -csatolással szerkesztett bázisban „csaknem diagonális” (abszolút értékben kicsinyek a nem

diagonális mátrixelemek a diagonális mátrixelemekhez képest). Nehéz atomok esetében általában a $j - j$ -csatolás bázisfüggvényei jó közelítést adják az energiasajátállapotok hullámfüggvényeinek.

Jelölje $\hat{j}_{1,2,\dots,n}$ az első n darab részecske teljes impulzusmomentumainak az összegét. Az eljárás azért lehetséges, mert

$$\begin{aligned} [\hat{J}^2, \hat{j}_a^2] &= 0, \quad [\hat{J}_z, \hat{j}_a^2] = 0, \quad [\hat{J}^2, \hat{j}_{1,2,\dots,n}^2] = 0, \quad [\hat{j}_{1,2,\dots,n}^2, \hat{j}_a^2] = 0, \\ [\hat{j}_{1,2,\dots,n}^2, \hat{j}_{1,2,\dots,n'}^2] &= 0. \end{aligned} \quad (5.2.12)$$

Jelöljük a $j - j$ -csatolás így kapott ortonormált bázis vektorait

$$|J, M_J, j_{1,2}, j_{1,2,3}, \dots, j_{1,2,3,\dots,N-1}, j_1, \dots, j_N\rangle \quad (5.2.13)$$

vektorokkal⁷³, ezekre fennállnak a

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |J, M_J, j_{1,2}, j_{1,2,3}, \dots, j_{1,2,\dots,N-1}, j_1, \dots, j_N\rangle &= \\ \hbar^2 J(J+1) |J, M_J, j_{1,2}, j_{1,2,3}, \dots, j_{1,2,\dots,N-1}, j_1, \dots, j_N\rangle, \\ \hat{J}_z |J, M_J, j_{1,2}, j_{1,2,3}, \dots, j_{1,2,\dots,N-1}, j_1, \dots, j_N\rangle &= \\ \hbar M_J |J, M_J, j_{1,2}, j_{1,2,3}, \dots, j_{1,2,\dots,N-1}, j_1, \dots, j_N\rangle \\ \hat{j}_a^2 |J, M_J, j_{1,2}, j_{1,2,3}, \dots, j_{1,2,\dots,N-1}, j_1, \dots, j_N\rangle &= \\ \hbar^2 j_a(j_a+1) |J, M_J, j_{1,2}, j_{1,2,3}, \dots, j_{1,2,\dots,N-1}, j_1, \dots, j_N\rangle, \\ \hat{j}_{1,2,\dots,n}^2 |J, M_J, j_{1,2}, j_{1,2,3}, \dots, j_{1,2,\dots,N-1}, j_1, \dots, j_N\rangle &= \\ \hbar^2 j_{1,2,\dots,n}(j_{1,2,\dots,n}+1) |J, M_J, j_{1,2}, j_{1,2,3}, \dots, j_{1,2,\dots,N-1}, j_1, \dots, j_N\rangle \end{aligned} \quad (5.2.14)$$

sajátérték-egyenletek.

Példaként nézzük meg 3 részecske esetét. Az 1-es és 2-es részecske teljes impulzusmomentumának összecsatolása a

$$|j_{1,2}, m_{1,2}, j_1, j_2\rangle = \sum_{m_{j1}, m_{j2}} (j_{1,2}, m_{1,2} | j_1, m_{j1}, j_2, m_{j2}) |j_1, m_{j1}\rangle \otimes |j_2, m_{j2}\rangle \quad (5.2.15)$$

állapotot eredményezi, ahol $j_{1,2} = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2$ és $m_{1,2} = -j_{1,2}, -j_{1,2} + 1, \dots, j_{1,2} - 1, j_{1,2}$ értékű lehet. A harmadik részecske teljes impulzusmomentumának hozzácsatolása eredményezi a rendszer teljes impulzusmomentumának

⁷³Az ortogonalitást az impulzusmomentum összeadás szabályai automatikusan biztosítják, a normálás alkalmas normálási együtthatók választásával biztosítható.

sajátállapotait:

$$\begin{aligned}
& |J, M_J, j_{1,2}, j_1, j_2, j_3\rangle \\
&= \sum_{m_{1,2}, m_3} (J, M_J | j_{1,2}, m_{1,2}, j_3, m_{j3}) | j_{1,2}, m_{1,2} \rangle \otimes | j_3, m_{j3} \rangle \\
&= \sum_{m_{1,2}, m_{j1}, m_{j2}, m_{j3}} (J, M_J | j_{1,2}, m_{1,2}, j_3, m_{j3}) (j_{1,2}, m_{1,2} | j_1, m_{j1}, j_2, m_{j2}) \\
&\quad | j_1, m_{j1} \rangle \otimes | j_2, m_{j2} \rangle \otimes | j_3, m_{j3} \rangle,
\end{aligned} \tag{5.2.16}$$

ahol $J = |j_{1,2} - j_3|, |j_{1,2} - j_3| + 1, \dots, j_{1,2} + j_3 - 1, j_{1,2} + j_3$, $j_{1,2} = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2$ és $M_J = -J, -J + 1, \dots, J - 1, J$.

2. Az $L-S$ -csatolás, vagy más néven *Russell-Saunders-csatolás*⁷⁴. Ennek lényege, hogy az egyes részecskék pályamomentumait előbb összeadjuk az eredő L pályamomentummá, az egyes részecskék spinjeit pedig az S eredő spinné, ezeket adjuk össze a rendszer J teljes impulzusmomentumává. Ezt a bázist akkor érdemes használni, ha az egyes részecskék spinje és pályamomentuma között a kölcsönhatás gyenge, viszont az eredő pályamomentum és az eredő spin között jelentős a kölcsönhatás. Ez végső soron megint azt jelenti, hogy akkor célszerű az $L - S$ -csatolás használata, ha ebben a csatolásban a rendszer Hamilton-operátora diagonális, vagy „csaknem diagonális”. A könnyű atomok esetében általában az $L - S$ -csatolás bázisfüggvényei adják az energiasajátállapotok hullámfüggvényeinek jobb közelítéseit.

Érdemes megjegyezni, hogy az eredő spin és az eredő pályaimpulzusmomentum közötti spin-pálya kölcsönhatás operátorában fellépő $\hat{L} \cdot \hat{S}$ szorzat

$$\hat{L} \cdot \hat{S} = \frac{1}{2} [\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2] \tag{5.2.17}$$

alakba írható, ami azt jelenti, hogy ennek a kölcsönhatásnak a mátrixa az $L - S$ -csatolású bázisban diagonális:

$$\frac{1}{2} \hbar^2 [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]. \tag{5.2.18}$$

A könnyű atomok energiaszintjeinek spin-pálya-kölcsönhatás miatti felhasadása tehát az L és S kvantumszámokkal jellemezhető: az eredetileg adott L -vel jellemzett energiaszinthez tartozó multiplett a J (és S) különböző értékeinek megfelelő további energiaszintekre hasad fel a spinpálya-kölcsönhatás következtében.

⁷⁴Henry Norris Russell (1877-1957) és Frederick Albert Saunders (1875-1963) amerikai fizikusok.

5.3. Részecskeazonosság. Fermionok és bozonok

A részecskeazonosság kvantummechanikai értelmezése. A részecskék azonossága a kvantummechanika szerint azt jelenti, hogy az azonos részecskéket semmilyen fizikai módszerrel nem lehet megkülönböztetni egymástól. A részecskék azonosságának ez az értelmezése sokkal szigorúbb, mint a klasszikus fizikában a részecskék azonosságának fogalma. Ott az egyes részecskéket meg lehet jelölni, és külön-külön nyomon lehet követni a mozgásukat. Mindegyiknek jól definiált pályája van. Ugyanezt nem lehet a kvantummechanikában elmondani. Ha egy fizikai rendszer azonos részecskékből áll, akkor semmilyen fizikai módszerrel nem lehet megjelölni vagy beazonosítani ezeket, hogy melyik az 1-es, a 2-es, stb. részecske. Csak annyit lehet tudni, hogy hány darab azonos részecske van a rendszerben, de nem lehet őket „címkével”, „sorszámmal”, stb. ellátni.

Azonos részecskék rendszerének hullámfüggvénye. Ha N darab azonos részecskéből áll a fizikai rendszer, akkor annak a hullámfüggvénye tetszőleges két részecske felcserélésével szemben vagy szimmetrikus, vagy antiszimmetrikus. Ezt a következőképpen láthatjuk be. Jelölje x_i ($i = 1, 2, \dots, N$) az i -edik részecske összes szabadsági fokait, azaz legyen $x_i = (\vec{r}_i, \sigma_i, \dots)$ az i -edik részecske helyzetvektorának, spinvetületének, egyéb szabadsági fokainak összessége. Tetszőleges két részecske (mondjuk az j -edik és a k -adik) felcserélése esetén a rendszer minden mérhető tulajdonságának változatlanul kell maradnia. Többek között annak a valószínűsége sem változhat meg, hogy egy részecskét x_j , egy másikat pedig x_k adatokkal találunk a rendszerben, ezért teljesülnie kell a

$$|\psi(\dots, x_j, \dots, x_k, \dots)|^2 = |\psi(\dots, x_k, \dots, x_j, \dots)|^2 \quad (5.3.19)$$

egyenlőségnek a rendszer $\psi(x_1, \dots, x_N)$ hullámfüggvényére. Ez azonban azt jelenti, hogy tetszőleges két részecske felcserélése esetén a hullámfüggvény legfeljebb egy egységnyi abszolút értékű komplex számmal szorozódhat:

$$\psi(\dots, x_k, \dots, x_j, \dots) = e^{i\alpha} \psi(\dots, x_j, \dots, x_k, \dots), \quad (5.3.20)$$

ahol $\alpha \in [0, 2\pi]$ valós szám. Ha most még egyszer felcseréljük a két részecskét, akkor vissza kell kapjuk az eredeti hullámfüggvényt⁷⁵. Ugyanazon két részecske újabb felcserélése azt jelenti, hogy a hullámfüggvény újabb $e^{i\alpha}$ fázisfaktorról szorozódik,

$$\begin{aligned} \psi(\dots, x_j, \dots, x_k, \dots) &= e^{i\alpha} \psi(\dots, x_k, \dots, x_j, \dots) \\ &= e^{2i\alpha} \psi(\dots, x_j, \dots, x_k, \dots), \end{aligned} \quad (5.3.21)$$

ahonnan

$$e^{2i\alpha} = 1, \implies e^{i\alpha} = \pm 1 \quad (5.3.22)$$

⁷⁵Az alapfeltevésünk a kvantummechanikában, hogy a hullámfüggvény egyértékű függvényként létezik

adódik. Ez pontosan azt jelenti, hogy a hullámfüggvény tetszőleges két részecske felcserélésével szemben vagy szimmetrikus, vagy antiszimmetrikus lehet.

Lehet másképpen is érvelni. Vegyük egyszerűség kedvéért a 2 darab, azonos részecskéből álló rendszer példáját. Legyen a rendszer Hamilton-operátora $\hat{H}$ és hullámfüggvénye $\psi(1, 2)$. Jelölje $\hat{P}_{1,2}$ a két részecske egymással történő felcserélésének operátorát. Akkor a 2 részecske felcserélésével kapott rendszer hullámfüggvénye

$$\psi'(1, 2) = \hat{P}_{1,2}\psi(1, 2) = \psi(2, 1). \quad (5.3.23)$$

Az 2 részecske ismételt felcserélésével visszaáll az eredeti állapot, azaz

$$\psi(1, 2) = \hat{P}_{1,2}\psi(2, 1) = \hat{P}_{1,2}\psi'(1, 2) = \hat{P}_{1,2}^2\psi(1, 2), \quad (5.3.24)$$

úgyhogy

$$\hat{P}_{1,2}^2 = \hat{1} \quad (5.3.25)$$

az egység-operátor. Mi lesz a 2 részecske felcserélésével kapott rendszer $\hat{H}'$ Hamilton-operátora? Nyilván az eredeti rendszerre és a 2 részecske felcserélésével kapott rendszerre is érvényes a Schrödinger-egyenlet:

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi(1, 2; t) &= \hat{H}\psi(1, 2; t), \\ i\hbar\partial_t\psi'(1, 2; t) &= \hat{H}'\psi'(1, 2; t). \end{aligned} \quad (5.3.26)$$

Írjuk az utóbbit az alábbi alakba:

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t[\hat{P}_{1,2}\psi(1, 2; t)] &= [\hat{P}_{1,2}]^2\hat{H}'[\hat{P}_{1,2}\psi(1, 2; t)], \\ \hat{P}_{1,2}[i\hbar\partial_t\psi(1, 2; t)] &= \hat{P}_{1,2}[(\hat{P}_{1,2}\hat{H}'\hat{P}_{1,2})\psi(1, 2; t)] \end{aligned} \quad (5.3.27)$$

Hassunk az utóbbi egyenlet mindkét oldalára a $\hat{P}_{1,2}$ operátorral,

$$i\hbar\partial_t\psi(1, 2; t) = (\hat{P}_{1,2}\hat{H}'\hat{P}_{1,2})\psi(1, 2; t), \quad (5.3.28)$$

majd a kapott egyenletet hasonlítsuk össze a részecskék felcserélése előtti rendszerre vonatkozó Schrödinger-egyenlettel, és akkor leolvashatjuk, hogy

$$\hat{H} = \hat{P}_{1,2}\hat{H}'\hat{P}_{1,2}, \quad \hat{H}' = \hat{P}_{1,2}\hat{H}\hat{P}_{1,2}. \quad (5.3.29)$$

Ha a 2 részecske nem lenne azonos, akkor a részecskék felcserélésével kapott rendszerek fizikailag is különbözhetnének. Azonos részecskék esetében azonban a részecskék felcserélése ugyanazt a fizikai rendszert eredményezi és ugyanazt a fizikai állapotot:

$$\hat{H}' = \hat{P}_{1,2}\hat{H}\hat{P}_{1,2} = \hat{H}, \quad (5.3.30)$$

azaz

$$[\hat{H}, \hat{P}_{1,2}] = 0, \quad (5.3.31)$$

vagyis az azonos részecskékből álló két-részecskés fizikai rendszer Hamilton-operátora kommutál a részecskék felcserélésének operátorával. Ez azt jelenti, hogy az energia-sajátállapotok egyúttal a $\hat{P}_{1,2}$ operátor sajátállapotainak választhatók. Keressük meg a részecske-felcserélés $\hat{P}_{1,2}$ operátorának sajátértékeit, sajátfüggvényeit! Legyen $\psi(1, 2)$ sajátfüggvény, akkor fennáll a

$$\hat{P}_{1,2}\psi(1, 2) = \lambda\psi(1, 2) \quad (5.3.32)$$

sajátérték-egyenlet. Ha ennek mindkét oldalára hatunk a $\hat{P}_{1,2}$ operátorral, akkor

$$\psi(1, 2) = \hat{P}_{1,2}^2\psi(1, 2) = \lambda\hat{P}_{1,2}\psi(1, 2) = \lambda^2\psi(1, 2) \quad (5.3.33)$$

egyenlőség adódik, ahonnan azt kapjuk, hogy $\lambda^2 = 1$, azaz a lehetséges sajátértékek:

$$\lambda = +1, \quad \lambda = -1. \quad (5.3.34)$$

A $\lambda = +1$ sajátértékhez tartozó sajátállapotokra a

$$\psi(2, 1) = \hat{P}_{1,2}\psi(1, 2) = +\psi(1, 2) \quad (5.3.35)$$

tulajdonság teljesül, azaz ezek az állapotok szimmetrikusak a két részecske felcserélésével szemben. A $\lambda = -1$ sajátértékhez tartozó sajátállapotokra a

$$\psi(2, 1) = \hat{P}_{1,2}\psi(1, 2) = -\psi(1, 2) \quad (5.3.36)$$

tulajdonság teljesül, azaz ezek az állapotok antiszimmetrikusak a két részecske felcserélésével szemben.

A fentiek azt kellene, hogy jelentsék, hogy két azonos részecskéből álló fizikai rendszer minden energia-szintje kétszeresen elfajult a részecskék felcserélésével szemben mutatott tulajdonság tekintetében, azaz tartozik hozzá egy szimmetrikus és egy antiszimmetrikus állapot. A Természet azonban **nem** valósítja meg ezt a fajta kettősséget! **A két azonos részecskéből álló rendszernek csak szimmetrikus állapotai vannak, ha a részecskék bozonok, és csak antiszimmetrikus állapotai vannak, ha a részecskék fermionok.**

Bozonok és fermionok. Mint arról már beszéltünk, **a Természetben a részecskéket két osztályba lehet sorolni aszerint, hogy milyen a spinjük. Az egész spinű, azaz az $s = 0, \hbar, 2\hbar, \dots$ 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 részecskéből álló rendszerekre vonatkozóan a tapasztalattal egyező eredményeket, ha a lineáris szuperpozíció elve és a Heisenberg-féle határozatlansági elv mellett további **alapelvként elfogadjuk a részecskeazonosság elvét. Ez kimondja, hogy az azonos bozonok rendszerének hullámfüggvénye tetszőlegesen választott két részecske felcserélésével szemben szimmetrikus, az azonos fermionok rendszerének hullámfüggvénye pedig tetszőlegesen választott két részecske felcserélésével szemben antiszimmetrikus. Az azonos fermionokra vonatkozó utóbbi állítás a Pauli-elv legáltalánosabb megfogalmazása**⁷⁶.

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 $\varphi_{\nu_1}(x_1) \dots \varphi_{\nu_N}(x_N)$ N -tényezős szorzatfüggvények. Mivel azonban a rendszer $\Psi(x_1, \dots, x_N)$ hullámfüggvénye bármely két részecske felcserélésével szemben antiszimmetrikus, azért lineárisan kombinálható az összes lehetséges $\varphi_{\nu_1}(x_1) \dots \varphi_{\nu_N}(x_N)$ szorzatok antiszimmetrizált kifejezéseiből,

⁷⁶A Pauli-elv „legáltalánosabb megfogalmazása” alatt a Pauli-elv olyan megfogalmazását értjük, amelyik nem használja fel az egy-részecskés állapotok fogalmát.

amelyek nem mások, mint az összes lehetséges

$$\begin{aligned}
\psi_{\nu_1, \dots, \nu_N}(x_1, \dots, x_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \varphi_{\nu_1}(x_1) & \varphi_{\nu_1}(x_2) & \cdots & \varphi_{\nu_1}(x_N) \\ \varphi_{\nu_2}(x_1) & \varphi_{\nu_2}(x_2) & \cdots & \varphi_{\nu_2}(x_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{\nu_N}(x_1) & \varphi_{\nu_N}(x_2) & \cdots & \varphi_{\nu_N}(x_N) \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \varphi_{\nu_1}(P(1)) \varphi_{\nu_2}(P(2)) \cdots \varphi_{\nu_N}(P(N))
\end{aligned} \tag{5.3.37}$$

determinánsok, az ún. **Slater-determinánsok**. Itt $P(1), P(2), \dots, P(N)$ jelenti az $1, 2, \dots, N$ változók tetszőleges permutációját, $\sum_P$ pedig összegzést jelent az összes lehetséges permutációkra, továbbá $(-1)^P = +1$, ill. -1 aszerint, hogy a P permutáció az $1, 2, \dots, N$ változó sorrend páros, ill. páratlan permutációja.

Fontoljuk most meg, hogy hány darab részecskével lehet betöltve ugyanaz az egy-részecskés állapot. Ha egy Slater-determinánsban legalább két ν_i index megegyezik, akkor a determináns értéke azonosan nulla. Ez azt jelenti, hogy az N darab azonos fermionból álló rendszer állapota csak olyan részecske-konfigurációk lineáris szuperpozíciója lehet, amikor minden részecske más egy-részecskés állapotban van. **A Pauli-elv azt mondja ki⁷⁷, hogy azonos fermionok rendszerében bármely egy-részecskés állapot legfeljebb csak egy fermionnal lehet betöltve. Más szóval, két azonos fermion egy rendszeren belül nem tartózkodhat ugyanabban 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. Ha a $\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_r$ egy-részecskés állapotok rendre $n_{\nu_1}, n_{\nu_2}, \dots, n_{\nu_r}$ darab azonos bozonnal vannak be-

⁷⁷A Pauli-elvnek ez a megfogalmazása az egy-részecskés állapotok fogalmára támaszkodik, ezért kevésbé általános, mint a hullámfüggvény antiszimmetrikusságát állító megfogalmazás.

töltve, akkor az $N = n_{\nu_1} + n_{\nu_2} + \dots + n_{\nu_r}$ részecskés állapot hullámfüggvénye

$$\begin{aligned}
& \psi_{n_{\nu_1}, n_{\nu_2}, \dots, n_{\nu_r}}(1, 2, \dots, N) \\
&= \sqrt{\frac{n_{\nu_1}! n_{\nu_2}! \dots n_{\nu_r}!}{N!}} \sum_P \underbrace{\varphi_{\nu_1}(P(1)) \varphi_{\nu_1}(P(2)) \dots}_{n_{\nu_1}} \\
&\quad \times \underbrace{\varphi_{\nu_2}(P(n_{\nu_1} + 1)) \varphi_{\nu_2}(P(n_{\nu_1} + 2)) \dots \varphi_{\nu_3}(P(n_{\nu_1} + n_{\nu_2} + 1)) \varphi_{\nu_3}(P(n_{\nu_1} + n_{\nu_2} + 2)) \dots}_{n_{\nu_2}} \\
&\quad \dots \underbrace{\varphi_{\nu_r}(P(\sum_{r'=1}^{r-1} n_{\nu_{r'}} + 1)) \varphi_{\nu_r}(P(\sum_{r'=1}^{r-1} n_{\nu_{r'}} + 2)) \dots}_{n_{\nu_r}} \quad (5.3.38)
\end{aligned}$$

5.4. A részecskeazonosság néhány következménye

A részecskeazonosság elve tehát megköveteli, hogy az azonos részecskékből álló rendszer hullámfüggvénye fermionok esetén antiszimmetrikus, bozonok esetén szimmetrikus legyen bármely két részecske felcserélésével szemben. Ennek további következményei vannak, amelyek közül itt csak néhányat említünk.

1. *Az elektronok Coulomb-szórásának szórási amplitudója antiszimmetrikus az elektronok felcserélésével szemben.* Például vegyünk két elektront, amelyek hullámcsomagjai kezdetben elég jól lokalizáltak és amelyek csaknem jól definiált impulzussal indulnak el nagy távolságról egymás felé. A TKP rendszerben a két bejövő elektron impulzusának várható értéke azonos nagyságú és ellentétes irányú. Mondjuk az egyiket „balról”, a másikat „jobbról” indítottuk el. Tegyük fel, hogy a két elektron között csak elektrosztatikus kölcsönhatás, azaz Coulomb-kölcsönhatás van, ami független a spintől és emiatt a kölcsönhatás miatt szóródik a két elektron egymáson. Minden más kölcsönhatást elhanyagolunk. A kísérletet úgy végezzük, hogy az elektronok spinállapotát sem kezdetben sem a végállapotban nem figyeljük meg. Amikor az elektronok hullámcsomagjai a kölcsönhatást követően ismét messzire eltávolodnak egymástól, akkor újra két, lényegében szabadon repülő elektront fogunk látni, amelyek impulzusának várható értéke a TKP rendszerben azonos nagyságú, ellentétes irányú. Ez az irány azonban szöget zár be a bejövő elektronok irányával, amit eltérülési szögnek nevezünk. Legyen a bejövő részecskék iránya párhuzamos a z -tengellyel, a végállapotban elrepülő elektronok impulzusának iránya zárjon be θ , ill. $\pi - \theta$ szöget a z -tengellyel, és legyen φ a bejövő és a szórt elektronok impulzusai által kifeszített síknak, a szórási síknak az x -tengellyel bezárt szöge. Vegyük észre, hogy a θ és φ szögek éppen a 2 elektron $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ relatív helyzetvektorának gömbi polárkoordinátái.

Az elektronok megkülönböztethetlensége miatt azt nem tudjuk semmilyen módon eldönteni, hogy a végállapotban melyik az az elektron, amelyik „balról” és melyik, amelyik „jobbról” indult el eredetileg. Ezért a (θ, φ) és a $(\pi - \theta, \varphi + \pi)$ irányokba történő szóródás differenciális hatáskeresztmetszetének meg kell egyeznie, hiszen a két elektron felcserélése a végállapotban annak felel meg, hogy a relatív helyzetvektor előjelet vált, ill. hogy a (θ, φ) irányba szóródó elektron felcserélődik a $(\pi - \theta, \pi + \varphi)$ irányba szóródó elektronnal. A z -tengely körüli forgásszimmetria miatt azonban a szórási sík minden irányítása egyenlően valószínű, úgyhogy a differenciális szórási hatáskeresztmetszet csak a θ szögtől függ. A differenciális szórási hatáskeresztmetszet tehát azonos kell legyen a θ és a $\pi - \theta$ eltérülési szög esetén. A differenciális szórási hatáskeresztmetszet viszont a megfelelő szórási amplitudó abszolút értékének a négyzete, $\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$. Ezért az $f(\theta)$ és az $f(\pi - \theta)$ szórási amplitudó csak egy egységnyi abszolút értékű komplex fázisban különbözhet egymástól:

$$f(\pi - \theta) = e^{i\alpha} f(\theta), \quad (5.4.39)$$

ahol $\alpha \in [0, 2\pi]$ valós. Ráadásul, ha a két elektront felcseréljük, majd újra felcseréljük, akkor vissza kell kapjuk az eredeti $f(\theta)$ amplitudót. Ezért $e^{2i\alpha} = 1$ kell teljesülnön, ahonnan a keresett fázisfaktor szóba jöhető értékei: $e^{i\alpha} = \pm 1$. Ez másképpen azt jelenti, hogy a szórási amplitudó vagy szimmetrikus, vagy antiszimmetrikus lehet a két elektron felcserélésével szemben. Tudjuk azonban azt is, hogy a szórási amplitudót ha megszorozzuk az $\frac{1}{r}e^{ikr}$ gömbhullámmal ($r = |\vec{r}|$ és $k\hbar$ a berepülő, ill. a rugalmas szórás után kirepülő elektronok impulzusának nagysága), akkor a szórt részecskék relatív mozgásának hullámfüggvényét kapjuk. Ennek a Pauli-elv miatt antiszimmetrikusnak kell lennie a két elektron felcserélésével szemben, amiből következik, hogy az $e - e$ szórási amplitudónak is antiszimmetrikusnak kell lennie.

Képzeld 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: $f(\theta) \propto f_d(\theta) \pm f_d(\pi - \theta)$, amelyek közül a Pauli-elv az antiszimmetrikus lehetőséget követeli meg. **Az elektronok Coulomb-szórása esetén a szórási amplitudó a két elektron felcserélésével szemben antiszimmetrikus:**

$$f(\theta) \propto f_d(\theta) - f_d(\pi - \theta). \quad (5.4.40)$$

Az antiszimmetrizálás eredménye abban mutatkozik meg, hogy az elektron elektronon történő Coulomb-szóródásának differenciális hatáskeresztmetszete

különbözik a klasszikus mechanikai úton számolt Rutherford-féle szórási hatáskeresztmetszetszettől. A hatáskeresztmetszet mindkét esetben szimmetrikus, $\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{d\sigma(\pi-\theta)}{d\Omega}$. Amíg azonban a Rutherford-féle szórási hatáskeresztmetszet szigorúan monoton csökken a $\theta \in [0, \frac{1}{2}\pi]$ intervallumban, nem zérus értékű minimuma van $\theta = \pi/2$ esetén és szigorúan monoton nő a $\theta \in [\pi/2, \pi]$ intervallumban, addig a kvantummechanikai differenciális hatáskeresztmetszet értéke a $\theta = \pi/2$ minimumban zérus, és a direkt és kicserélődési amplitudó interferenciája miatt további mellékmaximumokkal és -minimumokkal rendelkezik.

Azonos bozonok esetén a szórási amplitudó a direkt és a kicserélődési folyamat amplitudóinak az összege. A két folyamat interferenciájának az eredményeként a differenciális szórási hatáskeresztmetszet a $\theta = \pi/2$ irányban nagyobb, mint megkülönböztethető részecskék esetén lenne, és most is jelentkeznek a mellékmaximumok és -minimumok.

2. A kölcsön nem ható azonos részecskék rendszerének alapállapota lényegesen különbözik aszerint, hogy fermionok vagy bozonok alkotják a rendszert. Kölcsön nem ható, azonos fermionok rendszerében az alapállapotot a Pauli-elv és az energia-minimum elvének figyelembe vételével úgy kaphatjuk meg, hogy a fermionokkal elkezdjük benépesíteni egyesével, növekvő energiájuk sorrendjében az egy-részecskés állapotokat. Ha a fermion-rendszer valamennyi, N darab részecskéjét ily módon elhelyeztük a megfelelő egy-részecskés állapotokban, akkor egy bizonyos energiaszintig, az ϵ_F Fermi-energiáig minden egy-részecskés állapot egyszeresen be lesz töltve, míg a Fermi-szint fölött minden egy-részecskés állapot betöltetlen marad. Az alapállapot hullámfüggvényét olyan Slater-determináns írja le, amely a Fermi-szint alatti összes, betöltött egy-részecskés állapot hullámfüggvényének N -tényezős szorzatából antiszimmetrizálással áll elő.

A kölcsön nem ható, azonos bozonok rendszerében az alapállapotot az jellemzi, hogy minden egyes bozon ugyanazt az egy-részecskés alapállapotot tölti be. Az egy-részecskés alapállapot betöltési száma megegyezik a teljes N részecske-számmal, az egy-részecskés gerjesztett állapotok betöltési száma zérus.

3. Egy másik fontos következmény az, hogy amennyiben egy egy-részecskés állapot be van töltve, akkor ez a tény befolyásolja azt, hogy milyen valószínűséggel kerülhet további részecske ugyanebbe az állapotba⁷⁸.

Az azonos fermionok rendszerében a Pauli-elv megtiltja, hogy két részecske ugyanabba az egy-részecskés állapotba kerüljön.

Azonos bozonok rendszerében a következő furcsaság jelentkezik. Legyen w annak a valószínűsége, hogy egy betöltetlen egy-részecskés

⁷⁸Az alábbiak bizonyítása meghaladja ennek az előadásnak a kereteit. A későbbi kvantummechanikai tanulmányok során, az úgynevezett második kvantálás kapcsán fogjuk ezt tárgyalni.

állapot betöltődik. Tegyük fel, hogy már n darab bozon van ebben az állapotban. Ekkor annak a valószínűsége, hogy egy további bozon kerül ebbe az állapotba, $(n + 1)w$. Azt szokás mondani, hogy az állapot spontán betöltődésének w valószínűségéhez hozzáadódik annak a „stimulált” (serkentett) folyamatnak az nw valószínűsége, amit az a tény vált ki, hogy az adott egy-részecskés állapotban már van n darab részecske. A bozonok annál inkább „szeretnek” egy adott állapotba kerülni, minél több részecske van már ebben az állapotban.

A bozonállapotok betöltési számainak fenti tulajdonsága teszi lehetővé a mézer és a lézer működését, és ugyancsak jelentős szerepe van a sugárzás és az anyag közti termikus egyensúly kialakulásában.

4. További nagy horderejű következmény a **spin-statisztika tétel**. A **spin-statisztika tétel kimondja, hogy az egymással kölcsön nem ható, azonos fermionok rendszerében a Fermi-Dirac-statisztika, a kölcsön nem ható, azonos bozonok rendszerében a Bose-Einstein-statisztika érvényes**. Jelölje n_α az egymással kölcsön nem ható, azonos részecskék T hőmérsékletű rendszerében azt az átlagos betöltési számot, amivel az ϵ_α energiájú φ_α egy-részecskés állapot be van töltve. (Egyszerűség kedvéért helyezkedjen el a rendszer V térfogatban, akkor az egy-részecskés állapotok α indexe, azaz az egy-részecskés állapotokat jellemző kvantumszámok diszkrét.) Jelölje $\alpha = 0$ az egy-részecskés alapállapotot. **A Fermi-Dirac statisztika esetén**

$$n_\alpha = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_\alpha - \mu}{k_B T}} + 1}, \quad (5.4.41)$$

a Bose-Einstein statisztika esetén pedig

$$n_\alpha = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_\alpha - \mu}{k_B T}} - 1}, \quad (5.4.42)$$

ahol μ a kémiai potenciál, ami a hőmérséklet függvénye, k_B pedig a Boltzmann-állandó.

Abszolút zérus hőmérsékleten az elektronok kémiai potenciálja a Fermi-energia, $\mu(T = 0) = \epsilon_F$. A Fermi-Dirac-statisztika azt jelenti, hogy abszolút zérus fokon a rendszer kvantummechanikai alapállapota valósul meg, a Fermi-szint alatt minden egy-részecskés állapot egyszeresen be van töltve, a Fermi-szint fölött minden egy-részecskés állapot betöltetlen. Ha a hőmérséklet $T > 0$, akkor a Fermi-szint alatt pontosan annyi betöltetlen állapot jelenik meg, mint ahány állapot betöltődik a Fermi-szint fölött. Az alapállapotra jellemző eloszlás „fellazulása” a Fermi-szint körüli kb. $k_B T$ szélességű energiasávban történik meg.

Bozonok esetére példaként a fotonok rendszere szolgálhat. Ekkor a kémiai potenciál $\mu = 0$. A fotonoknak zérus a nyugalmi tömege, a töltése, stb., ami-

re megmaradási törvény vonatkozna, így a fotonok száma nem megmaradó egy V térfogatú, az edény falával termikus egyensúlyban levő elektromágneses sugárzásban. A T hőmérséklet csökkenése esetén a Bose-Einstein-eloszlásnak megfelelően egyre inkább az alapállapot töltődik be fotonokkal, miközben a gerjesztett állapotok fokozatosan kiürülnek. Ha az azonos bozonok nem zérus nyugalmi tömegű részecskék, pl. $S = 0$ triplet-állapotú He-atomok, akkor az N részecskeszám megmaradó mennyiség, a kémiai potenciál nem zérus, de ahogy a hőmérséklet egy kritikus T_0 érték alá csökken, akkor nullává válik. A gerjesztett egy-részecskés állapotok a Bose-Einstein-statisztika szerint vannak betöltve. Amíg $T > T_0$, addig az alapállapot átlagos betöltési száma zérus. Amikor azonban a hőmérséklet a T_0 kritikus érték alá csökken, akkor az alapállapotot nem nulla számú atom kezdi benépesíteni. A hőmérséklet további csökkentésével egyre jobban kiürülnek a gerjesztett egy-részecskés állapotok és a korábban gerjesztett állapotban volt részecskék közül egyre több kerül alapállapotba, Végül abszolút zérus hőmérsékleten mind az N darab atom az alapállapotba kerül. Azt a jelenséget, hogy alacsony hőmérsékleten a bozonok ugyanazt az alapállapotot kezdik benépesíteni, Bose-kondenzációnak nevezik. A T_0 hőmérséklet a Bose-kondenzáció megindulásának hőmérséklete. Nagyságrendileg a $k_B T_0$ termikus gerjesztési energia összemérhető annak a zérusponti rezgésnek az ϵ_0 energiájával, amivel egy V/N átlagos térfogatban elhelyezkedő atom rendelkezik,

$$k_B T_0 \sim \epsilon_0 \sim \left(\hbar \frac{2\pi}{L/2} \right)^2 / 2m \sim \frac{8\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \sim \frac{8\pi^2 \hbar^2}{2m} (N/V)^{2/3} \quad (5.4.43)$$

ahol felhasználtuk, hogy egy atom számára rendelkezésre álló térfogat lineáris mérete $L \sim (V/N)^{1/3}$. Itt N/V az atomok részecskeszám-sűrűsége.

5.5. A lézer*

Mielőtt a lézer működési elvére rátérnénk, el kell mondani, hogy Einstein már 1917-ben megmutatta, hogy az atomi rendszerek háromféle sugárzási folyamatban tudnak résztvenni:

1. **abszorpció**, amikor az atom energiát vesz fel a sugárzási térből,
2. **spontán (önkéntelen, magától bekövetkező) emisszió**, amikor az atom külső behatás nélkül bocsát ki sugárzást,
3. **stimulált (serkentett) emisszió**, amikor az atomot a külső sugárzási tér készleteti sugárzás kibocsátására.

Az elektromágneses sugárzás fotonokból áll. A fotonok $1\hbar$ spinnel rendelkező, zérus nyugalmi tömegű részecskék. Legyen adott atomi átmenet során egy $\vec{k}$ impulzusú foton kibocsátásának valószínűsége w . Ha az atom környezetében már van jelen n darab ugyanilyen foton, akkor $(n+1)w$ annak a valószínűsége, hogy újabb ugyanilyen $\vec{k}$ impulzusú foton kerül kibocsátásra stimulált emisszió révén. Ebben mutatkozik meg az, hogy **a fotonok bozonok és az azonos bozonok**

„jobban szeretik” azt az állapotot benépesíteni, amely már nem teljesen üres, mint az üres állapotot.

A lézer működési elve a következő. Tegyük fel, hogy a lézert olyan közegben valósítjuk meg, amelynek atomjai két gerjesztett állapottal rendelkeznek. Legyen az atomok alapállapota E_0 energiájú, E_1 és E_2 meg két gerjesztett állapot energiája, amelyekre $E_0 < E_1 < E_2$. Tegyük fel továbbá, hogy az E_2 energiájú állapot viszonylag hosszú élettartamú. Gerjesszük valamilyen módszerrel az atomokat, hogy azok többsége az E_2 energiájú gerjesztett állapotba kerüljön. Ez lehetséges gázlézerben termikus gerjesztés révén, vagy szilárdtestlézerben $\Omega = (E_2 - E_0)/\hbar$ frekvenciájú gerjesztő fénnyel történő besugárással. Némi ügyességgel elérhető, hogy így létrejöjjön az úgynevezett **inverz populáció**, amikor több atom tölti be az E_2 energiájú gerjesztett állapotot, mint az E_0 energiájú alapállapotot. Ez pontosan a fordítottja annak a betöltésnek, ami T hőmérsékleten eredetileg megvalósul, amikor is az alapállapot van jobban betöltve és a gerjesztett állapot kevésbé⁷⁹. Ez tehát az állapotok fordított benépesítése, azaz inverz populációja.

Miután létrehoztuk az inverz populációt, valamelyik atom spontán módon emittál egy $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$ frekvenciájú fotont és történik egy átmenet az E_2 energiájú állapotból az E_1 energiájú állapotba. A lézerközeget tartalmazó edény két áttellenes falán párhuzamos tükrök helyezkednek el, amelyek sokszor visszaverik oda-vissza a kibocsátott fényt. Ha sikerül a spontán emittált fotont így benntartani a közegben, akkor annak az impulzusa merőleges a tükrökre. Ettől kezdve kétszeresre nő annak a valószínűsége, hogy újra ilyen foton fog emittálódni amikor a következő gerjesztett atom emittál, mert jelentkezik a **stimulált emisszió**. A lézer két végén elhelyezett tükörrel tudjuk biztosítani, hogy csak a tükrökre merőleges impulzusú fotonok tudnak a rendszerben maradni. Így a további spontán emissziók fotonjai általában eltávoznak és a rendszerben összegyűlnek a további atomok stimulált emissziójából származó, azonos fotonok. Rövidesen tehát **makroszkopikus számú azonos foton jelenik meg, amelyek hullámfüggvényei a stimulált emisszió miatt azonos fázisban vannak és így szuperponálódnak egymásra**. Végeredményben tehát makroszkopikusan mérhető intenzitású, koherens sugárzás, lézerfény jelenik meg. **A sugárzás koherenciája a lézernek, mint sugárforrásnak a legfontosabb előnye a hagyományos fényforrásokkal szemben**. Az atomok a lézerfoton kibocsátása után az $E_1 - E_0$ energia spontán kibocsátása révén visszakerülnek az alapállapotba. Az inverz populációt tehát a lézer folyamatos működése érdekében folyamatos gerjesztéssel fenn kell tartani. A lézerfény további előnye, hogy nagyon monokromatikussá és nagyon párhuzamossá tehető. Utóbbi azt jelenti, hogy nagyon kicsi a lézernyalábot alkotó lézersugarak széttartási szöge.

A lézerekre alapozva az atomok spektroszkópiai vizsgálatában egy új módszer fejlődött ki, a **lézerspektroszkópia**⁸⁰, azaz az atomoknak lézerfény segítségével történő vizsgálata. A fény abszorpcióját és spontán emisszióját már a hagyományos atomi spektroszkópia is hasznosította, ezen alapult az atomi energiaszintek vizsgálata. Sokáig nem sikerült azonban a gyakorlatban hasznosítani a stimulált emissziót. Az 1950-es években amerikai és szovjet tudósok egyaránt megpróbálták hasznosítani az atomi rendszerek stimulált emisszióját abból a célból, hogy gyenge mikrohullámú jeleket erősítsenek fel és mikrohullámú oszcillátort működtessenek. Ekkor fejlesztették ki a **mézert**⁸¹. Shawlownak, Townesnak és Prokhorovnak úttörő szerepe volt a mézer-elv

⁷⁹Ha N_0 , ill. N_2 rendre az alap-, ill. a gerjesztett állapotban található atomok száma és T a lézer közegének hőmérséklete, akkor $N_2 = N_0 \exp\left(-\frac{E_2 - E_0}{k_B T}\right)$, ahol k_B a Boltzmann-állandó.

⁸⁰Nicolaas Bloembergen (1920-, holland) és Arthur Leonard Shawlow (1921-1999, amerikai) egyenlő arányban részesültek az 1981. évi fizikai Nobel-díjban a lézerspektroszkópia kifejlesztése terén végzett munkásságukért. A díj második felét Kai M.B. Siegbahnnak (1918-, svéd) ítelték oda a nagy feloldóképességű elektronspektroszkópia kifejlesztésében végzett munkásságáért.

⁸¹„Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation” első betűiből képezett betűszó, jelentése mikrohullám erősítése sugárzás stimulált emissziója révén. Az 1964. évi fizikai Nobel-

infravörös és optikai tartományra történő kiterjesztésében. Ez vezetett a lézer-elvhez⁸². Az első működő lézert 1960-ban építették. Azóta lézerek működnek az egész látható tartományban és az infravörös meg az ultraibolya tartomány egy-egy részében is. A lézer csaknem ideális eszközzé vált az atomok és a molekulák tulajdonságainak spektroszkópiai tanulmányozása terén. Ebből a célból számos spektroszkópiai módszert dolgoztak ki. A lézerspektroszkópiai módszerek közül nem egy az anyagok nem lineáris optikai viselkedésén alapul, kihasználva, hogy a lézerfény intenzitása olyan nagy lehet, hogy a lineáris anyagi összefüggések érvényüket veszítik a közegben.

5.6. Atomok Mengyelejev-féle periódusos 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 sajátosságait 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:

$$\hat{H} = \sum_{a=1}^Z \left[-\frac{\hbar^2 \Delta_{\vec{r}_a}}{2m_e} - \frac{Ze^2}{|\vec{r}_a|} \right] + \frac{1}{2} \sum_{a,b=1}^Z \frac{e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_b|}, \quad (5.6.44)$$

ahol az első tag az egyes elektronok kinetikus energiáinak és az atommag Coulomb-terében felvett potenciális energiáinak az összege, a második tag pedig az elektronok közötti Coulomb-kölcsönhatásnak az energiája⁸³. Rögzített Z rendszám esetén az

díjban fele-részen Charles H. Townes (1915-, amerikai) részesült a kvantumelektronika területén végzett alapvető munkásságáért, amely a mézer-lézer elven működő erősítők és oszcillátorok kifejlesztéséhez vezetett. A díj másik felében egyenlő arányban Nikolai Gennadievich Basov (1922-2001, orosz) és Alexander Mikhail Prokhorov (1916-2002, orosz) részesültek azokért az alapozó kísérleti fizikai kutatásaikért, amelyek a mézer és a lézer felfedezéséhez vezettek.

⁸²A lézer a „Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation” kezdőbetűiből alkotott betűszó, jelentése fényerősítés sugárzás stimulált emissziója révén.

⁸³Azzal a közelítéssel élünk, hogy az atom tömegközéppontja és az atommag egybe esik, és ezt

atom alapállapotának megkeresése tehát azt jelenti, hogy meg kell határozni azt az antiszimmetrikus hullámfüggvényt, amely az atom Hamilton-operátorának legkisebb energia-sajátértékéhez tartozik. A feladatot az elektronok közötti kölcsönhatás teszi bonyolulttá. Ezért a feladatot, a H-atom, ill. a H-szerű atomok (ionok) esetét kivéve, nem lehet közelítések nélkül megoldani. A jelen előadás keretében nem 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 olvasztható bele az átlagos potenciálba, már csak gyenge, ún. maradék-kölcsönhatás. Ha a maradék-kölcsönhatást elhanyagoljuk, akkor a centrális potenciálban szokásos n fő- és ℓ mellékkvantumszámokkal jellemzett (n, ℓ) egy-elektronos állapotokról beszélhetünk. Ezek elnevezése most is $1s$, $2s$, $2p$, stb. elektron-pályák, mint a H-atom esetén. Az egyes pályákhoz, az elektron spinvetületének 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:

a pontot választottuk a koordináta-rendszerünk origójának. Az egyszerűség kedvéért a Coulomb-kölcsönhatáson kívül minden más kölcsönhatást elhanyagolunk.

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.

5.7. Ideális gázok alacsony hőmérsékleten*

Az ideális gáz sok valóságos fizikai rendszernek jó közelítő modellje. A ritka gázok első közelítésben ideális gázként viselkednek, csak növekvő sűrűséggel jelentkeznek bennük a részecskék kölcsönhatása miatti eltérések az ideális viselkedéstől. A fémekben a vezetési elektronok szintén jó közelítéssel ideális gázt alkotnak, ideális fermi-gázt, mert a feles spinű elektronok fermionok. A szilárdtestek kvantált rácsrezgései úgy tekinthetők, mint ideális bozon-gáz, fononok gáza. A hőmérsékleti sugárzás ugyancsak ideális bozon-gáz, fotonok gáza. ezek azok a kísérletileg is vizsgálható fontosabb esetek, amikor **a kvantummechanika makroszkopikus méreteken történő jelentkezésének lehetünk a tanúi. Az adott makroszkopikus test makroszkopikus jellemzői közötti termodinamikai összefüggések alakja módosul a kvantummechanika miatt ahhoz képest, mint amilyen összefüggéseket a klasszikus fizika alapján várnánk.** A

klasszikus fizika alapján várttól eltérő viselkedés ezekben az esetekben végső soron a részecskeazonosság kvantummechanikai következményének tulajdonítható.

A ritka gázok alacsony hőmérsékleten másképpen viselkednek aszerint, hogy a gárrészecskék bozonok vagy fermionok. A hőmérsékleti sugárzás vizsgálata a kvantummechanika alapjainak lefektetése során is rendkívül fontos szerepet játszott, mint a klasszikus fizika törvényei alapján meg nem érthető jelenség (ld. az A.1 függelékét). Ugyanígy a szilárdtestek fajhőjének alacsony hőmérsékleten mutatott hőmérséklet-függését sem lehet a kvantummechanika, az ideális fonongáz tulajdonságainak ismerete nélkül megérteni (ld. az A.1 függelékét). A fémek vezetési tulajdonságainak, a fotoeffektus során szerepet játszó kilépési munkának, stb. a megértése szempontjából megintcsak döntő az ideális elektrongáz kvantummechanikai alapon történő tárgyalása (ld. az A.1 függelékét).

Az ideális gázon olyan fizikai rendszert értünk, amelyet az alábbi tulajdonságok jellemeznek:

1. a gáz részecskéi nem hatnak kölcsön egymással,
2. a részecske-rendszert az tartja össze, hogy a részecskék egy V térfogatú edény falai közt végezhetnek „szabad” mozgást,
3. a gáz részecskéi az edény falának részecskéivel ütközve véletlenszerűen vehetnek fel, ill. adhatnak le energiát, amelynek révén a gáz az edény T hőmérsékletű falával termikus egyensúlyba kerül⁸⁴.

Az ideális gáz viselkedésére jellemzők a makroszkopikus jellemzői közötti összefüggések. Ezek elméleti értelmezésével, - itt nem részletezhető módon - a statisztikus fizika és a termodinamika foglalkozik. Ilyen összefüggések pl. a p nyomás, mint a gáz T hőmérsékletének és $n = N/V$ részecskesűrűségének a függvénye egyensúlyi állapotban (N a gáz részecskéinek száma, V a gáz térfogata), vagy a gáz U energiája (belső energiája), mint T , n és V függvénye, stb. Meg lehet mutatni, hogy minden (nem zérus nyugalmi tömegű, belső szerkezet nélküli, azonos részecskékből álló) ideális gáz elég magas hőmérsékleten

$$\frac{U}{V} = \frac{3}{2}nk_B T, \quad p = nk_B T \quad (5.7.45)$$

törvényszerűségeket mutat, ahol k_B a Boltzmann-állandó. Ez a viselkedés akkor lenne érvényes tetszőleges hőmérséklet esetén, ha a gáz részecskéi klasszikus mechanikai objektumok lennének, amelyek nem engedelmeskednek a kvantummechanika törvényeinek.

Valójában azonban a részecskék a kvantummechanika törvényeinek engedelmeskednek. Ez alacsony hőmérsékleten észre is vehető. Ha a gáz hőmérséklete olyan alacsony, hogy $k_B T \lesssim \epsilon_0$, ahol ϵ_0 a V/N térfogatba kényszerített részecske alapállapotú energiája, akkor az ideális gáz makroszkopikus jellemzői közötti termodinamikai összefüggések megváltoznak. Ilyenkor a részecskék zérusponti kvantumfluktuációinak ϵ_0 energiája összemérhető a termikus gerjesztések $k_B T$ átlagos energiájával, vagy annál jelentősebb. Ezért a kvantumfluktuációk következtében a makroszkopikus jellemzők közti törvényszerűségek megváltoznak. A kvantumeffektusok következtében a feles spinű fermionok gáza, és az egész spinű bozonok gáza alacsony hőmérsékleten nemcsak a klasszikus ideális gázétól eltérő viselkedést mutat, hanem egymásétól is. A fermionok gáza esetében a Pauli-elv a fermionok között hasonlóan jelentkezik, mint valamiféle taszítás, és ezért sem a gáz belső energiája, sem a gáz nyomása nem tűnik el zérus hőmérsékleten, hanem véges pozitív értékhez tartanak. Ugyanakkor a bozonok ideális gáza esetében mind a belső energia, mind a nyomás a

⁸⁴Termikus egyensúlyról akkor beszélünk, ha a gáz részecskéinek a fal részecskéivel történő egyedi ütközései révén időegység alatt átlagosan ugyanannyi energiát ad le a falnak, mint amennyit felvesz tőle.

hőmérsékletnek T^α hatványfüggvénye szerint nullához tart, ahol $\alpha > 1$, ellentétben a klasszikus ideális gázzal, amikor a kitevő $\alpha = 1$ lenne. A belső energia és a nyomás tehát a klasszikus fizika alapján előrejelzett lineáris hőmérséklet-függésnél gyorsabban tart nullához, ha a hőmérséklet zérushoz tart.

Az elmondottakat a tapasztalat megerősíti. A megfigyelt törvényszerűségek értelmezése a kvantummechanika, a statisztikus fizika és a termodinamika törvényeinek egyidejű figyelembe vételével lehetséges. Az ideális gázok alacsony hőmérsékleten mutatott termodinamikai viselkedése szép példája annak, hogy a kvantummechanika a makroszkopikus testek makroszkopikus jellemzői közötti törvényszerűségekbe is észrevehetően „beleszólhat”.

5.8. Bose-kondenzátumok interferenciája*

A Bose-Einstein-kondenzáció jelensége, mint erről már szoltunk, abban áll, hogy egész spinű és valamilyen megmaradó tulajdonsággal (pl. részecskeszámmal, töltéssel) rendelkező, azonos részecskék ideális gázában elég alacsony hőmérsékleten, a korábban említett Bose-kondenzáció T_0 hőmérséklete alatt minden részecske igyekszik ugyanazt az egy-részecskés kvantumállapotot, a legkisebb energiájú alapállapotot betölteni.

A feketetest sugárzás Planck-féle törvényét Bose⁸⁵ vezette le először 1924-ben azon az alapon, hogy a sugárzást azonos részecskékből (fotonokból) álló gáznak tekintette. Az ő megfontolásait általánosította Einstein olyan atomok vagy molekulák ideális gázára, amelyekben a részecskeszám megmaradó, és még ugyanabban az évben megmutatta, hogy elég alacsony hőmérsékleten be kell következnie a kondenzációnak. Az elméleti megfontolásokból nyilvánvaló, hogy csak az egész spinű részecskék, a bozonok kondenzálódnak. Azok is csak akkor, ha van valamilyen megmaradó tulajdonságuk, mint pl. a részecskeszám.

Hosszú évtizedeken át folytak kísérletek a Bose-Einstein-kondenzátum laboratóriumi megvalósítására zérus, pontosabban csaknem zérus abszolút hőmérsékleten. Cornell, Wieman⁸⁶ és munkatársai hozták létre az első kondenzátumot rubidium atomok ultrahideg gázában. Később még ugyanebben az évben Ketterle és munkatársai az MIT-ban nátrium-atomok gázában valósították meg a kondenzátumot. Ettől kezdve robbanásszerűen nőtt meg az érdeklődés a kondenzátumok tulajdonságainak vizsgálata iránt. Az egyik legérdekesebb tulajdonság, hogy a kondenzátum egy koherens állapotú, sok atomból felépülő anyagdarab, amelyet egyetlen, jól definiált fázissal rendelkező hullámfüggvény ír le⁸⁷. A koherencia közvetlen kísérleti ellenőrzése megtörtént. Két egymás mellett mágneses csapdában hoztak létre kondenzátumokat, majd megszüntették közöttük a „mágneses válaszfalat”, és észlelték az interferenciát, amelyet a kondenzátumok állandó fáziskülönbséggel rendelkező hullámfüggvényeinek szuperpozíciója hoz létre⁸⁸. A Bose-Einstein-kondenzátum tehát a koherens lézerezőnek anyaghullámmal megvalósított analogonja. Mint ilyen, a Bose-Einstein-kondenzáció alapja lehet **atomlézerek** létrehozásának, amelyekben a közönséges lézer fotonjainak

⁸⁵Satyendra Nath Bose (1892-1974, indiai) fizikus, a kvantumstatisztika egyik szellemi atyja, akinek nevét viselik a bozonok és a Bose-Einstein-statisztika. Meghnad Sahaval közös munkájuk eredménye a gázok Saha-Bose-féle állapotegyenlete.

⁸⁶A 2001. évi fizikai Nobel-díjat megosztva kapták Eric A. Cornell (1961-), Wolfgang Ketterle (1957-) és Carl E. Wieman (1951-) alkáli atomok híg gázában a Bose-Einstein-kondenzáció megvalósításáért és azokért a kezdeti, alapvető fontosságú vizsgálatokért, amelyek során a kondenzátumok tulajdonságait tanulmányozták.

⁸⁷Itt nem részletezhető, hogy a koherens kondenzátum létrejöttéhez a bozonok közötti gyenge vonzó kölcsönhatás jelenléte is szükséges.

⁸⁸ld. pl. <http://physicsweb.org/article/world/10/3/3/2>

szerepét atomok veszik át.

A Bose-Einstein-kondenzátumokat ma már felhasználják olyan Michelson⁸⁹-interferométerek készítésére, amelyekben fény helyett kondenzátumok interferálnak⁹⁰. Egy hullámvezetőben Bose-Einstein-kondenzátumot hoznak létre atomokból, amely kezdetben nyugalomban van. Ezt elektromágnesesen két kondenzátumra „hasítják”, amelyek ellentétes $\pm\vec{p}$ impulzusokkal mozognak és a hullámvezető végein elhelyezett tükrökön reflektálódnak. Végül, amikor a két kondenzátum visszaér a kiindulási helyére, akkor ott elektromágneses impulzusokkal újra egyesítik őket. A találkozó kondenzátumok ekkor meghatározott fáziskülönbséggel interferálnak. A fáziskülönbségüket úgy lehet változtatni, hogy a hullámvezető mentén térbeli gradienssel rendelkező mágneses teret alkalmaznak, amíg a két kondenzátum szét van választva egymástól. Az ilyen Michelson-interferométerek nagy előnye, hogy kis méretűek (egyetlen „chip”-en megvalósíthatók) és alkalmasak az elektromágneses mező finom változásainak érzékelésére. Valószínűleg érzékelőkben, úgynevezett szenzorokban nyerne majd technikai alkalmazást.

⁸⁹Albert Abraham Michelson (1852-1931) 1907-ben fizikai Nobel-díjjal tüntették ki precíziós optikai berendezéseiért és az azokkal végzett spektroszkópiai és metrológiai kutatásaiért. Edward Williams Morleyval (1838-1923) közösen végzett és világhírűvé vált interferometriás kísérlete (1887) a relativitáselmélet alapjául szolgál. Fontos az a felismerése, hogy a hosszegység visszavezethető hullámhossz mérésére.

⁹⁰Ying-Yu Wang, Dana Z. Anderson, Victor M. Bright, Eric A. Cornell, Quentin Diot, Tetsuo Kishimoto, Mara Prentiss, R.A. Saravanan, Stephen R. Segal, Saijun Wu, An Atom Michelson Interferometer on a Chip Using a Bose-Einstein Condensate, arXiv:cond-mat/0407689

6. KÖZELÍTŐ MÓDSZEREK

A kvantummechanikai problémák megoldása általában nem lehetséges egzaktul, hanem közelítő módszerek alkalmazását igényli. A kvantummechanikai problémák néhány tipikus csoportja

1. a stacionárius állapotok energiáinak és hullámfüggvényeinek meghatározása;
2. időben változó kölcsönhatások hatására átmenetek jöhetnek létre különböző kvantumállapotok között, ezek átmeneti amplitudójának meghatározása;
3. környezetükkel gyengén kölcsönható rendszerek elbomlanak, ilyen rendszerek energianívói kiszélesedésének és élettartamának (bomlási szélességének és felezési idejének) meghatározása.

Ezeket kívül még számos más, fontos problémátípust lehetne említeni, amelyekkel azonban a jelen jegyzet keretein belül nem kívánunk foglalkozni.

6.1. Stacionárius állapotok meghatározása

A stacionárius állapotok meghatározása, azaz a stacionárius állapotok energiájának és hullámfüggvényének meghatározása egyike a kvantummechanika alapfeladatainak. Ez társulhat olyan további kérdések megválaszolásával, hogy bizonyos fizikai mennyiségeknek mi a várható értéke a stacionárius állapotokban. A feladat elvileg egzaktul megoldható, ha tetszőlegesen választunk egy bázist a Hilbert-térben és a Hamilton-operátor mátrixát diagonalizáljuk. A gyakorlatban ez a módszer csak azal a közelítéssel alkalmazható, hogy a bázist csonkítani kell. A feladatot sokszor úgy érdemes megoldani, hogy a Hamilton-operátort két tag összegére bontjuk, $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, ahol $\hat{H}_0$ sajátérték-problémájának a megoldása ismert és V -t kicsiny zavarának, gyenge perturbációnak lehet tekinteni. Ha a V zavar csatolási állandója g , azaz $V \sim \mathcal{O}(g)$, ahol g „kicsi”, akkor az eredeti, nem perturbált rendszer energiaszintjei és stacionárius állapotainak hullámfüggvényei csak kicsit különböznek a nem perturbált H_0 rendszer energiaszintjeitől és stacionárius állapotainak hullámfüggvényeitől. Ezeket az eltéréseket a g csatolási állandó hatványsora alakjában, úgynevezett perturbációs sor alakjában keressük. A módszert perturbációs számításnak nevezzük. Külön fogjuk tárgyalni azt az esetet, amikor az eredeti, nem perturbált rendszer energianívói nem elfajultak, ill. amikor elfajultak.

6.1.1. A Hamilton-operátor diagonalizálása

Oldjuk meg a

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (6.1.46)$$

sajátértékproblémát jól definiált (de itt nem specifikált) határfeltételekkel. Ez lehet pl. az, hogy a rendszer V térfogata véges. Ilyenkor minden energiasajátérték diszkrét, minden stacionárius állapot normája véges, és a $V \rightarrow \infty$ határesetet utóbb képezhetjük, ha arra vagyunk kíváncsiak.

Legyen az adott határfeltételeknek eleget tevő állapotok egy tetszőlegesen választott ortonormált teljes rendszere $\{|\phi_n\rangle\}$. (Ezek általában nem sajátvektorai a $\hat{H}$ Hamilton-operátornak.) Tetszőleges $|\psi\rangle$ állapot kifejezhető ezen teljes rendszer szerint:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n \phi_n, \quad c_n = \langle \phi_n | \psi \rangle. \quad (6.1.47)$$

Ezt a kifejtést felhasználva a stacionárius Schrödinger-egyenlet

$$\sum_n c_n (\hat{H} - E) |\phi_n\rangle = 0 \quad (6.1.48)$$

alakot ölt. Szorozzunk rá az egyenlet mindkét oldalára balról a $\langle \phi_m |$ bra-vektorral és használjuk fel a $|\phi_n\rangle$ állapotvektorok ortonormáltságát, $\langle \phi_m | \phi_n \rangle = \delta_{m,n}$, akkor az alábbi homogén lineáris egyenletrendszert kapjuk az energia-sajátállapotok c_n kifejtési együtthatóira:

$$\sum_n (H_{m,n} - E \delta_{m,n}) c_n = 0. \quad (6.1.49)$$

ahol

$$H_{m,n} = \langle \phi_m | \hat{H} | \phi_n \rangle \quad (6.1.50)$$

a Hamilton-operátor mátrixa a $\{|\phi_n\rangle\}$ bázisban. Általában az állapotok Hilbert-tere megszámlálhatóan végtelen dimenziós, úgyhogy a kapott homogén lineáris egyenletrendszer – bár egzakt – nem kezelhető numerikusan csak akkor, ha a bázist csonkítjuk, azaz csak véges sok, N darab bázisvektorral dolgozunk. Utóbbi esetben N darab csatolt, homogén lineáris egyenletből álló egyenletrendszert kell megoldanunk. Ennek akkor és csak akkor létezik nem triviális megoldása, ha az egyenletrendszer determinánsa zérus,

$$\det (H_{m,n} - E \delta_{m,n}) = 0. \quad (6.1.51)$$

Általában olyan bázisállapotokat szokás használni, amelyek egy $\hat{H}_0$ Hamilton-operátor sajátállapotai,

$$\hat{H}_0 |\phi_n\rangle = E_{0n} |\phi_n\rangle. \quad (6.1.52)$$

Ha a bázisállapotokat növekvő energia szerint rendezzük és az N darab legalacsonyabb energiához tartozót vesszük, akkor ebben a csonkított bázisban az (6.1.51) egyenlet $N \times N$ -es mátrix determinánsának eltűnését követeli meg, és N darab gyöke van, E_r , $r = 1, 2, \dots, N$. Ezek a $\hat{H}$ Hamilton-operátor legalacsonyabban fekvő energiájú sajátállapotai. A bázis csonkítása miatt általában a magasabban gerjesztett állapotok energiáját egyre pontatlanabban lehet meghatározni. Az egyes

E_r energiasajátértékekhez tartozó hullámfüggvényeket, pontosabban a megfelelő $c_n^{(r)}$ együtthatókat a homogén lineáris egyenletrendszerből a megfelelő energiasajátérték behelyettesítése után határozhatjuk meg, ha a $\sum_{n=1}^N |c_n^{(r)}|^2 = 1$ normálási feltételt is figyelembe vesszük.

6.1.2. Idő-független, nem elfajult perturbációs számítás

Az időtől független perturbációs számítás a stacionárius Schrödinger-egyenlet közelítő megoldásának egyik módszere. Előnye, hogy elvileg korlátlanul javítható, ha a perturbációs sor konvergens. A rendszer $\hat{H}$ Hamilton-operátorát két tag összegére bontjuk,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (6.1.53)$$

ahol $\hat{H}_0$ az úgynevezett nem perturbált rendszer Hamilton-operátora, $\hat{V}$ pedig a perturbáló kölcsönhatás. A nem perturbált rendszer $\hat{H}_0$ Hamilton-operátora általában a rendszer kinetikus energiájának operátorát tartalmazza és tartalmazhatja a kölcsönhatásból származó potenciális energia jelentős részét. Általában $\hat{H}_0$ -t úgy választjuk, hogy ismert legyen a sajátérték-problémájának a megoldása, a nem perturbált E_{0n} energiaszintek és a hozzájuk tartozó $|\phi_n\rangle$ energiasajátállapotok. A $\hat{V}$ zavar, azaz a perturbáció többnyire valamilyen g csatolási állandóval arányos. A perturbációs számítás akkor működik, ha g értéke kicsi. A jelen fejezetben feltesszük, hogy a perturbálatlan rendszer energianívói nem elfajultak. Ezért a perturbációs számításnak az ebben a fejezetben ismertetett változatát nem elfajult perturbációs számításnak szokás nevezni.

A feladatunk a perturbált rendszer Hamilton-operátora sajátérték-problémájának a megoldása,

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \quad (6.1.54)$$

Az egyenletet úgy oldjuk meg, hogy a keresett állapotvektort is és a keresett energiasajátértéket is a perturbáció g csatolási állandója szerint sorbafejtjük:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\psi^{[0]}\rangle + |\psi^{[1]}\rangle + |\psi^{[2]}\rangle + \dots, \\ E &= E^{[0]} + E^{[1]} + E^{[2]} + \dots \end{aligned} \quad (6.1.55)$$

ahol $|||\psi^{[r]}||| \sim g^r$ és $E^{[r]} \sim g^r$ a perturbációs számítás r -edik rendjében az állapotvektor és az energia korrekciója. Az állapotvektor különböző rendű korrekcióit kifejtjük a $|\phi_n\rangle$ bázisban,

$$|\psi^{[r]}\rangle = \sum_n c_n^{[r]} |\phi_n\rangle \quad (6.1.56)$$

ahol $c_n^{[r]} = \mathcal{O}(g^r)$.

Az $r = 0$ -adik rendben a perturbálatlan rendszer E_{0n} energiaszintjéhez tartozó $|\phi_n\rangle$ állapottal indulunk, ezért $c_{n'}^{[0]} = \delta_{n,n'}$ és $|\psi_n^{[0]}\rangle = |\phi_n\rangle$, továbbá $E_n^{[0]} = E_{0n}$.

A perturbációs számítás különböző rendjeit úgy kapjuk, hogy a perturbációs sorokat behelyettesítjük a stacionárius Schrödinger-egyenletbe és annak két oldalán megköveteljük az azonos rendű tagok egyenlőségét:

$$\begin{aligned} & (\hat{H}_0 + \hat{V})(|\psi^{[0]}\rangle + |\psi^{[1]}\rangle + |\psi^{[2]}\rangle + \dots) \\ &= (E^{[0]} + E^{[1]} + E^{[2]} + \dots)(|\psi^{[0]}\rangle + |\psi^{[1]}\rangle + |\psi^{[2]}\rangle + \dots) \end{aligned} \quad (6.1.57)$$

ahonnan a nulladrendű, elsőrendű, másodrendű, stb. tagok egyenlősége rendre

$$\begin{aligned} \hat{H}_0|\psi^{[0]}\rangle &= E^{[0]}|\psi^{[0]}\rangle \\ \hat{H}_0|\psi^{[1]}\rangle + \hat{V}|\psi^{[0]}\rangle &= E^{[0]}|\psi^{[1]}\rangle + E^{[1]}|\psi^{[0]}\rangle, \\ \hat{H}_0|\psi^{[2]}\rangle + \hat{V}|\psi^{[1]}\rangle &= E^{[0]}|\psi^{[2]}\rangle + E^{[1]}|\psi^{[1]}\rangle + E^{[2]}|\psi^{[0]}\rangle \\ &\vdots \end{aligned} \quad (6.1.58)$$

Számoljuk ki a perturbálatlan rendszer n -edik energiasajátállapotának megváltozását a $\hat{V}$ perturbáció hatására. Ekkor $E_n^{[0]} = E_{0n}$, $|\psi_n^{[0]}\rangle = |\phi_n\rangle$. A perturbációs számítás első rendjében:

$$\hat{H}_0|\psi_n^{[1]}\rangle + \hat{V}|\phi_n\rangle = E_{0n}|\psi_n^{[1]}\rangle + E_n^{[1]}|\phi_n\rangle. \quad (6.1.59)$$

Szorozzunk rá az egyenlet mindkét oldalára $\langle\phi_m|$ bra-vektorral,

$$\begin{aligned} & \langle\phi_m|\hat{H}_0|\psi_n^{[1]}\rangle + \langle\phi_m|\hat{V}|\phi_n\rangle \\ &= E_{0n}\langle\phi_m|\psi_n^{[1]}\rangle + E_n^{[1]}\delta_{m,n}, \\ & (E_{0m} - E_{0n})\langle\phi_m|\psi_n^{[1]}\rangle + \langle\phi_m|\hat{V}|\phi_n\rangle = E_n^{[1]}\delta_{m,n}, \\ & (E_{0m} - E_{0n})c_m^{[1]} + V_{m,n} = E_n^{[1]}\delta_{m,n}, \end{aligned} \quad (6.1.60)$$

ahol bevezettük a perturbáló potenciál

$$V_{m,n} = \langle\phi_m|\hat{V}|\phi_n\rangle \quad (6.1.61)$$

mátrixelemeit. Az egyszerűbb jelölés kedvéért nem jelöljük a $c_m^{[r]}$ sorfejtési együtthatók indexében azt, hogy melyik $|\psi_n\rangle$ állapotvektor korrekciójában szerepelnek. Az $m = n$ esetből megkapjuk az energia elsőrendű korrekcióját,

$$E_n^{[1]} = V_{n,n} \quad (6.1.62)$$

ami nem más, mint a perturbáló potenciál diagonális mátrixeleme a perturbálatlan $|\phi_n\rangle$ állapotban, azaz a perturbáció átlagenergiája. Az $m \neq n$ eset pedig az állapotvektor elsőrendű korrekciójának $c_m^{[1]}$ ($m \neq n$) sorfejtési együtthatóit szolgáltatja,

$$c_m^{[1]} = -\frac{V_{m,n}}{E_{0m} - E_{0n}}. \quad (6.1.63)$$

A $c_n^{[1]}$ együtthatót a $\| |\phi_n\rangle + |\psi_n^{[1]}\rangle \|^2 = 1$ normálási feltételből (csak az elsőrendű tagokat megtartva) határozhatjuk meg:

$$\begin{aligned} 1 &= \| |\phi_n\rangle + |\psi_n^{[1]}\rangle \|^2 \\ &= 1 + \langle \phi_n | \psi_n^{[1]} \rangle + \langle \psi_n^{[1]} | \phi_n \rangle \\ &= 1 + c_n^{[1]} + c_n^{[1]*} \end{aligned} \quad (6.1.64)$$

aminek $c_n^{[1]} = i\gamma_n$ a megoldása, ahol $\gamma_n \sim \mathcal{O}(g)$ rendű valós szám. Ez azt jelenti, hogy az állapotvektor az elsőrendű korrekciókkal bezárólag

$$\begin{aligned} |\psi_n\rangle &= (1 + i\gamma_n)|\phi_n\rangle + \sum_{m \neq n} c_m^{[1]}|\phi_m\rangle + \mathcal{O}(g^2) \\ &= e^{i\gamma_n}|\phi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | \hat{V} | \phi_n \rangle}{E_{0m} - E_{0n}} |\phi_m\rangle + \mathcal{O}(g^2) \\ &= e^{i\gamma_n} \left(|\phi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | \hat{V} | \phi_n \rangle}{E_{0m} - E_{0n}} |\phi_m\rangle \right) + \mathcal{O}(g^2) \end{aligned} \quad (6.1.65)$$

Ez annak felel meg, hogy minden perturbált állapotvektor egy helyfüggetlen komplex fázissal szorozódik. Ezeknek azonban nincsen kihatása arra, hogy a perturbált állapotok ortonormáltsága fennálljon, és nem befolyásolják az energiaszintek korrekcióját sem. Az általánosság csorbítása nélkül élhetünk tehát a $\gamma_n = 0$ választással.

Tehát az energia és az állapotvektor változása a perturbációs számítás első rendjében:

$$E_{0n} \Rightarrow E_n = E_{0n} + V_{n,n}, \quad |\phi_n\rangle \Rightarrow |\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle - \sum_{m \neq n} \frac{V_{m,n}}{E_{0m} - E_{0n}} |\phi_m\rangle. \quad (6.1.66)$$

Az energia elsőrendű korrekciója aszerint pozitív, ill. negatív előjelű, hogy a perturbáció átlagenergiája milyen előjelű, azaz hogy rendre a perturbáció tasztító, ill. vonzó kölcsönhatást jelent a $|\phi_n\rangle$ állapotban. Az állapotvektor megváltozása alapján látjuk, hogy a perturbációs számítás akkor adhat jó közelítést, ha a perturbáció nem perturbált állapotok közötti mátrixelemeinek abszolút értéke sokkal kisebb, mint a megfelelő nem perturbált állapotok energiájának különbsége:

$$|V_{m,n}| \ll |E_{0m} - E_{0n}|. \quad (6.1.67)$$

Az állapotvektor megváltozása azt mutatja, hogy a perturbáció hatására az n -edik perturbálatlan állapot állapotvektorához a perturbáció hatására egyre csökkenő amplitudóval keverednek hozzá az n -edik nem perturbált állapottól energiában egyre távolabb levő állapotok. Az is nyilvánvaló, hogy ha a nem perturbált rendszer energiaszintjei nagyon közel vannak egymáshoz, azaz az energiaspektrum csaknem

elfajult, vagy szélső esetben elfajult, akkor a perturbációs számítás szerinti korrekció nagyon nagyra válik, ill. divergál, azaz ebben a formájában nem alkalmazható a perturbációs számítás. Az elfajult energiaspektrumú rendszer perturbációjával majd a következő fejezetben fogunk foglalkozni.

Térjünk most vissza a nem elfajult energiaspektrumú rendszer perturbációjára. A perturbációs számítás második rendjében

$$\hat{H}_0|\psi_n^{[2]}\rangle + \hat{V}|\psi_n^{[1]}\rangle = E_{0n}|\psi_n^{[2]}\rangle + V_{n,n}|\psi_n^{[1]}\rangle + E_n^{[2]}|\phi_n\rangle, \quad (6.1.68)$$

amit a $\langle\phi_m|$ bra-vektorral szorozva kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} & (E_{0m} - E_{0n})c_m^{[2]} - \sum_{n' \neq n} \frac{V_{n',n}}{E_{0n'} - E_{0n}} \langle\phi_m|\hat{V}|\phi_{n'}\rangle \\ &= -V_{n,n} \sum_{n' \neq n} \frac{V_{n',n}}{E_{0n'} - E_{0n}} \langle\phi_m|\phi_{n'}\rangle + E_n^{[2]}\delta_{m,n} \\ & (E_{0m} - E_{0n})c_m^{[2]} - \sum_{n' \neq n} \frac{(V_{m,n'} - V_{n,n}\delta_{m,n'})V_{n',n}}{E_{0n'} - E_{0n}} = E_n^{[2]}\delta_{m,n}. \end{aligned} \quad (6.1.69)$$

Innen az $m = n$ esetben kapjuk az energia másodrendű korrekcióját,

$$E_n^{[2]} = - \sum_{n' \neq n} \frac{|V_{n',n}|^2}{E_{0n'} - E_{0n}}, \quad (6.1.70)$$

az $m \neq n$ esetben pedig az állapotvektor másodrendű korrekciójának együtthatóit,

$$c_m^{[2]} = \sum_{n' \neq n} \frac{(V_{m,n'} - V_{n,n}\delta_{m,n'})V_{n',n}}{(E_{0m} - E_{0n})(E_{0n'} - E_{0n})} = \sum_{n' \neq n} \frac{V_{m,n'}V_{n',n}}{(E_{0m} - E_{0n})(E_{0n'} - E_{0n})} - \frac{V_{m,n}V_{n,n}}{(E_{0m} - E_{0n})^2}. \quad (6.1.71)$$

A $c_n^{[2]}$ együtthatót a normálási feltételből kapjuk meg (a másodrendű tagokkal bezárólag őrizve meg a tagokat):

$$\begin{aligned} 1 &= \langle\phi_n|\phi_n\rangle + \langle\phi_n|\psi_n^{[1]}\rangle + \langle\psi_n^{[1]}|\phi_n\rangle + \langle\psi_n^{[1]}|\psi_n^{[1]}\rangle + \langle\phi_n|\psi_n^{[2]}\rangle + \langle\psi_n^{[2]}|\phi_n\rangle \\ &= 1 + \sum_m |c_m^{[1]}|^2 + c_n^{[2]} + c_n^{[2]*}, \end{aligned} \quad (6.1.72)$$

ahonnan

$$c_n^{[2]} = -\frac{1}{2} \sum_m |c_m^{[1]}|^2 = -\frac{1}{2} \sum_{m \neq n} |c_m^{[1]}|^2 = -\frac{1}{2} \sum_{m \neq n} \frac{|V_{m,n}|^2}{(E_{0m} - E_{0n})^2}, \quad (6.1.73)$$

ahol ismét elhanyagoltunk egy lényegtelen fázisfaktort. Az n -edik energianívó és a hozzátartozó energia-sajátállapot tehát a perturbációs számítás második rendjével

bezárólag rendre

$$\begin{aligned}
E_n &= E_{0n} + V_{n,n} - \sum_{n' \neq n} \frac{|V_{n',n}|^2}{E_{0n'} - E_{0n}}, \\
|\psi_n\rangle &= |\phi_n\rangle - \sum_{m \neq n} \frac{V_{m,n}}{E_{0m} - E_{0n}} |\phi_m\rangle \\
&\quad + \sum_{m \neq n} \left[\sum_{n' \neq n} \frac{V_{m,n'} V_{n',n}}{(E_{0m} - E_{0n})(E_{0n'} - E_{0n})} - \frac{V_{m,n} V_{n,n}}{(E_{0m} - E_{0n})^2} \right] |\phi_m\rangle \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{m \neq n} \frac{|V_{m,n}|^2}{(E_{0m} - E_{0n})^2} |\phi_n\rangle.
\end{aligned} \tag{6.1.74}$$

Érdemes megemlíteni, hogy az alapállapot energiájának másodrendű korrekciója mindig negatív, ilyenkor ugyanis az összegzés az összes $m \neq n$ gerjesztett állapotra történik, amelyekre $E_{0m} - E_{0n} > 0$.

6.1.3. Degenerált perturbációszámítás

Tegyük fel, hogy a perturbálatlan rendszer energiaszintjei elfajultak és azt is, hogy a perturbáció energiája sokkal kisebb, mint a nem perturbált rendszer szomszédos energiaszintjeinek távolsága. Ekkor a perturbáció a nem perturbált rendszer egy-egy energiaszintjéhez tartozó állapotainak keveredését és az egyes energiaszintek elfajultságának csökkenését vagy teljes megszűnését eredményezi, de nem keverednek a szomszédos energiaszintekhez tartozó állapotok.

Tegyük fel, hogy a nem perturbált rendszer E_n energiaszintjének a perturbáció hatására történő felhasadását vizsgáljuk. A perturbálatlan rendszer E_n energiaszintjéhez az állapotok Hilbert-terének egy s_n dimenziós altere tartozik, ahol s_n az n -edik energianívó elfajultságának foka. Legyenek $|\phi_{nr}\rangle$ ($r = 1, 2, \dots, s$) ortonormált bázisállapotok, amelyek kifeszítik a nem perturbált rendszer E_n energiához tartozó állapotainak az alterét. A perturbált rendszer stacionárius állapotai a

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})|\psi\rangle = E'|\psi\rangle \tag{6.1.75}$$

stacionárius Schrödinger-egyenlet megoldásai. Általában a perturbált rendszer állapotai kifejezhetők a nem perturbált rendszer stacionárius állapotainak teljes rendszere szerint. Ha a perturbáció gyenge, azaz a $V_{m,n}$ mátrixelemek abszolút értéke kicsi a nem perturbált rendszer szomszédos energianívóinak a távolságához képest, akkor – mint azt a nem elfajult perturbációszámítás mutatja, – elhanyagolható annak a valószínűsége, hogy a perturbáció miatt a nem perturbált rendszer különböző energiaszintjeihez tartozó állapotai keveredjenek a perturbáció miatt. Ugyanakkor formálisan a zérus energiakülönbségű, azaz degenerált állapotok keveredésére a

nem elfajult perturbációs számítás szingularitást jelez. Valójában azzal a közelítéssel élhetünk, hogy a nem perturbált rendszer egy adott energiaszintjéhez tartozó állapotok keverednek csak egymással. Így feltehetjük, hogy a perturbált rendszer energiasajátérték-problémájának megoldását úgy kereshetjük, hogy a nem perturbált rendszer minden egyes energiaszintjéhez megkeressük a perturbált rendszer állapotainak megfelelő multipliettjét. Ezért a stacionárius Schrödinger-egyenletnek olyan megoldásait keressük, amelyek jó közelítéssel csak egy-egy adott energiaszinthez tartozó nem perturbált állapotok lineáris kombinációi:

$$|\psi\rangle = \sum_r c_r |\phi_{nr}\rangle. \quad (6.1.76)$$

Ezt behelyettesítve a stacionárius Schrödinger-egyenletbe:

$$\sum_{r=1}^{s_n} c_r (\hat{H}_0 + \hat{V}) |\phi_{nr}\rangle = E' \sum_r c_r |\phi_{nr}\rangle, \quad (6.1.77)$$

ahonnan a tetszőleges $\langle \phi_{nr'} |$ vektorral történő skaláris szorzással kapjuk az állapotvektor kifejtési együtthatóira az alábbi homogén lineáris algebrai egyenletrendszert:

$$\sum_{r=1}^{s_n} [(E_n - E') \delta_{r',r} + V_{(n,r'),(n,r)}] c_r = 0. \quad (6.1.78)$$

Ennek akkor és csak akkor létezik nem triviális megoldása, ha az egyenletrendszer determinánsa nulla,

$$\det [(E_n - E') \delta_{r',r} + V_{(n,r'),(n,r)}] = 0. \quad (6.1.79)$$

Az $s_n \times s_n$ -es mátrix determinánsának eltűnése matematikai szempontból az E' változó s_n -edrendű polinomjának eltűnését követeli meg. Ennek az egyenletnek pontosan s_n darab gyöke van. A gyökök valósak, mert a Hamilton-operátor önadjungált. Előfordulhatnak azonban azonos gyökök is, azaz általában nem biztos, hogy a perturbáció hatására a degeneráció teljes mértékben megszűnik⁹¹. A nem perturbált rendszer E_n energiaszintje a (6.1.79) egyenlet megoldásaiként meghatározható $E'_{n,m}$ ($m = 1, 2, \dots, s'_n$, $s'_n \leq s_n$) energiaszintekre hasad fel. Az m -edik energiaszinthez tartozó állapotot, ill. alteret az $E'_{n,m}$ energiasajátértéknek a (6.1.78) homogén lineáris egyenletbe történő visszahelyettesítésével és annak a megfelelő (adott m -hez tartozó) c_r együtthatókra történő megoldásával határozhatjuk meg.

Nézzük azt az egyszerű példát, amikor a nem perturbált rendszer E energiaszintje 2-szeresen elfajult. Legyenek a $|\phi_r\rangle$ ($r = 1, 2$) az elfajult energiaszinthez

⁹¹ Az, hogy a degeneráció milyen mértékben szűnik meg, azzal kapcsolatos, hogy a nem perturbált rendszer szimmetriái közül, melyeket sért le a perturbáció explicit módon.

tartozó ortonormált állapotok. A (6.1.78) homogén lineáris egyenletrendszer explicit alakja:

$$\begin{pmatrix} E - E' + V_{1,1} & V_{1,2} \\ V_{2,1} & E - E' + V_{2,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0. \quad (6.1.80)$$

A (6.1.79) egyenlet

$$(E - E' + V_{1,1})(E - E' + V_{2,2}) - |V_{1,2}|^2 = 0, \quad (6.1.81)$$

azaz

$$(E' - E)^2 - (V_{1,1} + V_{2,2})(E' - E) + V_{1,1}V_{2,2} - |V_{1,2}|^2 = 0 \quad (6.1.82)$$

alakot ölt, ahonnan a másodfokú egyenlet megoldóképlete segítségével a gyökök:

$$E'_\pm = E + \frac{1}{2}(V_{1,1} + V_{2,2}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(V_{1,1} - V_{2,2})^2 + |V_{1,2}|^2}. \quad (6.1.83)$$

Látjuk, hogy ha $V_{1,1} = V_{2,2}$ és $V_{1,2} = 0$, akkor az energiaszint nem hasad fel, hanem a nem elfajult perturbációszámításnak megfelelő elsőrendű energiakorrekciót szenved, $E' = E + V_{1,1}$. Általában azonban a degeneráció megszűnik. A későbbiek érdekében elemezzük részletesebben azt a speciális esetet, amikor $V_{1,1} = V_{2,2} = K$ és $V_{1,2} = V_{2,1} = A$. Ebben az esetben a nem perturbált, degenerált E energiaszint a (6.1.83) képlettel meghatározott 2 energiaszintre hasad fel a perturbáció következtében:

$$E'_\pm = E + K \pm A. \quad (6.1.84)$$

Ha ezeket a gyököket rendre visszahelyettesítjük pl. a (6.1.80) egyenletrendszer első egyenletébe, akkor megkapjuk a perturbált energiaszintekhez tartozó állapotok c_1 és c_2 kifejtési együtthatóinak az értékét és megfelelő perturbált energia-sajátállapot hullámfüggvényét:

$$\begin{aligned} E'_+ : \quad & \left(E - (E + K + A) + K \right) c_1 + A c_2 = 0, \Rightarrow c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ \Rightarrow \quad & |\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle); \end{aligned} \quad (6.1.85)$$

$$\begin{aligned} E'_- : \quad & \left(E - (E + K - A) + K \right) c_1 + A c_2 = 0, \Rightarrow c_1 = -c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ \Rightarrow \quad & |\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_1\rangle - |\phi_2\rangle). \end{aligned} \quad (6.1.86)$$

A $|\psi_+\rangle$ és a $|\psi_-\rangle$ állapot rendre a 2 bázisállapot szimmetrikus és antiszimmetrikus kifejezése.

Ha a fent ismertetett degenerált perturbációszámítás az energiaszintek elfajultságának megszűnését mutatja, akkor az eredményül kapott energiaszintek és állapotok, mint a nem elfajult perturbációszámítás nulladrendű közelítése, kiinduló pontként használhatók a perturbációszámítás magasabb rendjeinek megfelelő korrekciók meghatározásához, ami most már a nem elfajult perturbációszámítás módszerével történhet.

6.2. Időfüggő perturbációk

Most azzal az esettel foglalkozunk, amikor a nem perturbált rendszert az időtől ismert módon függő külső behatásnak vetjük alá, és amikor a külső térrel való kölcsönhatás energiája sokkal kisebb, mint a nem perturbált rendszer szomszédos stacionárius állapotainak energiakülönbsége. Ekkor a külső térrel történő kölcsönhatás perturbációnak tekinthető. Ha a külső tér és a vizsgált fizikai rendszer kölcsönhatását g csatolási állandó jellemzi, akkor a g csatolási állandó Taylor-soraként állítható elő az egyes energiaszintek és a hozzájuk tartozó állapotoknak a perturbáció miatti megváltozása.

6.2.1. Fermi-féle „arany szabály”

Legyen a nem perturbált rendszer (időtől független) Hamilton-operátora $\hat{H}_0$, és jelölje a perturbáló, időtől ismert módon függő külső térrel történő kölcsönhatás operátorát $\hat{V}(t)$. Tegyük fel, hogy ismertek a nem perturbált rendszer stacionárius állapotai, jelölje E_n a megfelelő energiaszinteket, $|\phi_n\rangle$ a megfelelő időtől független állapotvektorokat. Ekkor a nem perturbált rendszer stacionárius állapotainak időtől függő állapotvektorai $e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|\phi_n\rangle$. Keressük a perturbált rendszerre vonatkozó, időtől függő Schrödinger-egyenlet,

$$i\hbar\partial_t|\Psi(t)\rangle = [\hat{H}_0 + \hat{V}(t)]|\Psi(t)\rangle, \quad (6.2.87)$$

megoldását

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_m c_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t} |\phi_m\rangle \quad (6.2.88)$$

alakban. Az időfüggő perturbáció következménye, hogy a nem perturbált rendszer stacionárius állapotai triviális időfüggésének explicit módon történt leválasztása után a $c_n(t)$ sorfejtési együtthatók még további időfüggést kell, hogy tartsanak. Helyettesítsük be a (6.2.88) sorfejtést az időfüggő Schrödinger-egyenletbe:

$$\sum_m [i\hbar\dot{c}_m(t) + E_m c_m(t)] e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t} |\phi_m\rangle = \sum_m c_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t} [E_m + \hat{V}(t)] |\phi_m\rangle, \quad (6.2.89)$$

majd szorozzuk az egyenlet mindkét oldalát a $\langle\phi_{m'}|$ bra-vektorral. Ekkor a $c_{m'}(t)$ sorfejtési együtthatókra az alábbi közönséges elsőrendű, változó együtthatós, homogén lineáris differenciálegyenlet-rendszert kapjuk:

$$i\hbar\dot{c}_{m'}(t) = \sum_m e^{\frac{i}{\hbar}(E_{m'}-E_m)t} V_{m',m}(t) c_m(t) = \sum_m \bar{V}_{m',m}(t) c_m(t), \quad (6.2.90)$$

ahol

$$\bar{V}_{m',m}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}(E_{m'}-E_m)t} V_{m',m}(t) = \langle\phi_{m'}(t)|\hat{V}(t)|\phi_m(t)\rangle \quad (6.2.91)$$

a perturbáló potenciál operátorának mátrixa az időtől függő, perturbálatlan stacionárius állapotok alkotta ortonormált bázisban.

Ha a nem perturbált rendszer E_n energiaszintjéhez tartozó $|\phi_n\rangle$ állapot perturbációját akarjuk meghatározni, akkor az (6.2.90) egyenletrendszert a $c_m(0) = \delta_{m,n}$ kezdőfeltétellel kell megoldanunk.

A perturbatív megoldás lényege, hogy a $c_m(t)$ együtthatókat a perturbáló $\hat{V}$ potenciál g csatolási állandójának növekvő hatványai szerinti Taylor-sor alakjában keressük,

$$c_m(t) = c_m^{[0]} + c_m^{[1]}(t) + \dots, \quad (6.2.92)$$

ahol $c_m^{[r]}(t) \sim \mathcal{O}(g^r)$ a korrekció a perturbációs számítás r -edik rendjében. A megfelelő rendű tagok egyenlősége alapján határozzuk meg a sorfejtési együtthatók különböző rendű korrekcióit, rendre a perturbációs számítás egyre növekvő rendjeiben. A nulladik rendben a

$$i\hbar \dot{c}_m^{[0]} = 0 \quad (6.2.93)$$

egyenlet adódik, ahonnan

$$c_m^{[0]} = \text{const.} = c_m(0). \quad (6.2.94)$$

A perturbációs számítás első rendjében a $c_m^{[1]}(t)$ korrekcióra az alábbi egyenletet kapjuk:

$$i\hbar \dot{c}_{m'}^{[1]}(t) = \sum_m \bar{V}_{m',m}(t) c_m^{[0]}(t). \quad (6.2.95)$$

Innen integrálással azt kapjuk, hogy

$$c_{m'}^{[1]}(t) = \frac{-i}{\hbar} \sum_m \left(\int_0^t dt' \bar{V}_{m',m}(t') \right) c_m(0). \quad (6.2.96)$$

Alkalmazzuk a kapott eredményt arra az esetre, amikor a $t = 0$ időpillanatban a rendszer a perturbálatlan Hamilton-operátor n -edik stacionárius állapotában tartózkodik. Ekkor a perturbáció bekapcsolása után t idővel kialakuló állapot

$$\begin{aligned} |\psi_n(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |\phi_n\rangle + \sum_m c_m^{[1]}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} |\phi_m\rangle \\ &= [1 + c_n^{[1]}(t)] e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |\phi_n\rangle + \sum_{m \neq n} c_m^{[1]}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} |\phi_m\rangle. \end{aligned} \quad (6.2.97)$$

Ebből látszik, hogy annak a folyamatnak az amplitudója, hogy a $|\phi_n\rangle$ perturbálatlan stacionárius állapotból a rendszer az időtől függő perturbáció hatására átmenetet szenvedjen a $|\phi_m\rangle$ perturbálatlan stacionárius állapotba, éppen a

$$c_{m \leftarrow n}^{[1]}(t) = \frac{-i}{\hbar} \int_0^t dt' \bar{V}_{m,n}(t') \quad (6.2.98)$$

együttható. Ezért annak a $w_{m \leftarrow n}(t)$ valószínűsége, hogy az $n \rightarrow m$ átmenet t idő alatt létrejön a perturbáció hatására:

$$w_{m \leftarrow n}(t) = |c_{m \leftarrow n}^{[1]}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' \bar{V}_{m,n}(t') \right|^2. \quad (6.2.99)$$

Tekintsük az elsőrendű perturbációs számítás eredményének két speciális alkalmazását:

1. *Időtől független perturbáció esete.* Ez az eset „fából vaskarikának” tűnhet, de meg fogjuk látni, hogy mégis érdemes komolyan venni. Arról van szó, hogy a $t = 0$ időpillanatban hatni kezd a $\hat{V}$ időtől független perturbáció, ami aztán a t időpillanatban megszűnik (valójában tehát van időfüggése). A stacionárius állapotú rendszer $n \rightarrow m$ átmenetének valószínűsége ekkor

$$\begin{aligned} w_{m \leftarrow n}(t) &= \frac{|\bar{V}_{m,n}|^2}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{-i\omega_{m,n}t'} \right|^2 \\ &= \frac{|\bar{V}_{m,n}|^2}{\hbar^2} \left| \frac{e^{-i\omega_{m,n}t} - 1}{-i\omega_{m,n}} \right|^2 \\ &= \frac{2|\bar{V}_{m,n}|^2}{\hbar^2} \frac{1 - \cos(\omega_{m,n}t)}{\omega_{m,n}^2} \end{aligned} \quad (6.2.100)$$

ahol $\omega_{m,n} = (E_n - E_m)/\hbar$. Vizsgáljuk meg először, hogyan függ az átmeneti valószínűség az átmenet $\omega_{m,n}$ frekvenciájától. Az átmeneti valószínűség az $\omega_{m,n}$ változónak $\omega_{m,n} = 0$ helyen főmaximummal rendelkező, páros függvénye. A főmaximum értéke

$$w_{m \leftarrow n}(t) = \frac{g^2 |v_{m,n}|^2 t^2}{4\hbar^2}, \quad \text{ha } \omega_{m,n} = 0, \quad (6.2.101)$$

a függvénynek $\omega_{m,n} = \pm 2\pi/t, \pm 4\pi/t, \pm 6\pi/t, \dots$ helyeken minimumai vannak, amelyek értéke zérus, a mellékmaximumok értékei rohamosan csökkennek, ha $|\omega_{m,n}|$ nő. Ha a perturbáció bekapcsolásától számítva elég hosszú t idő telt el, $t \gg 2\pi/\omega_{m,n}$, akkor az átmenet valószínűsége (lásd a függelék):

$$w_{m \leftarrow n}(t) = \frac{2\pi |\bar{V}_{m,n}|^2}{\hbar^2} t \delta(\omega_{m,n}), \quad (6.2.102)$$

ami azt jelenti, hogy végtelen idő alatt az időtől független perturbáció hatására csak az azonos energiájú állapotok között történhet átmenet. Véges, de nagy t esetén azonban olyan állapotok között is történhet átmenet véges valószínűséggel, amelyek közti δE energiakülönbség nagyságrendje olyan, hogy $\delta E = \hbar\omega_{m \leftarrow n} = \mathcal{O}(\hbar\pi/t)$ megfelel a $w_{m \leftarrow n}(t)$ átmeneti valószínűség főmaximumához tartozó csúcs félértékszélességének. Az ilyen állapotok, ha léteznek, az $[E_n -$

$\delta E, E_n + \delta E]$ keskeny energiasávban foglalnak helyet, amelynek szélességét $2\delta E \sim 2\pi\hbar/t$ jellemzi. A következő pontban részletesen fogunk érvelni amellett, hogy a „nem perturbált” rendszer $\hat{H}_0$ Hamilton-operátorának spektruma valóban állhat „kiszélesedett” energiaszintekből, vagyis sok nagyon közeli energiájú energiaszintből álló keskeny energiasávokból, amelyeket egymástól jelentős energiakülönbség választ el. (Azt is látni fogjuk, hogy az energiaszintek ilyen kiszélesedése maga is valamiféle perturbáció következménye, amely már bele van foglalva a mostani „nem perturbált” $\hat{H}_0$ Hamilton-operátorba.)

Vezessük be a „kiszélesedett” nívóhoz tartozó m állapotok energia szerinti sűrűségét. Legyen $\rho_M(E)dE$ azon állapotok száma az $(E, E + dE)$ energiatartományban, amelyek az M -edik kiszélesedett nívóhoz (az M -edik keskeny sávhoz) tartoznak. Nyilvánvalóan $\rho_M(E)$ olyan függvény, amely csak egy E_M energia körüli keskeny, Γ szélességű energiasávban vesz fel zérustól különböző értékeket; Γ -t nívószélességnek nevezzük. Annak a valószínűsége, hogy ezen kiszélesedett energianívó n -edik állapotából az m -edik állapotába átmenet történjen, úgy kapható meg, hogy adott n esetén a $w_{m \leftarrow n}(t)$ átmeneti valószínűségeket összegezni kell az összes lehetséges végállapotra, amit a $\rho_M(E)$ állapotsűrűség segítségével az E energia szerinti integrálással helyettesíthetünk,

$$\begin{aligned} W_{M \leftarrow n}(t) &= \int w_{m \leftarrow n}(t) \rho_M(E) dE = \int 2|\bar{V}_{m,n}|^2 \frac{1 - \cos[(E - E_n)t/\hbar]}{(E - E_n)^2} \rho_M(E) dE. \end{aligned} \quad (6.2.103)$$

Ha E_m és E_n egyazon M kiszélesedett nívóhoz tartozó állapotok, akkor a $w_{m \leftarrow n}(t)$ átmeneti valószínűségi főmaximuma beleesik abba az intervallumba, ahol az adott kiszélesedett nívóhoz tartozó $\rho_M(E)$ energiasűrűség nem nulla. Ugyanakkor az állapotsűrűség és a $\bar{V}_{m,n}$ átmeneti mátrixelem is lassan változó függvénye E -nek, míg a $\frac{1 - \cos[(E - E_n)t/\hbar]}{(E - E_n)^2}$ függvény gyorsan változik. Ezért jó közelítés a lassú változású tényezőket az $E = E_n \approx E_M$ helyen venni és kiemelni az energia szerinti integrál elé,

$$W_{M \leftarrow n}(t) \approx 2|\bar{V}_{m,n}|^2 \rho_M(E_n) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1 - \cos[(E - E_n)t/\hbar]}{(E - E_n)^2} dE. \quad (6.2.104)$$

Itt az integrandus annyira éles maximummal rendelkezik az $E = E_n$ helyen, ha t nagy, hogy az integrálás határait kiterjeszthetjük a végtelenig. Felhasználva az integrandus $(\pi t/\hbar^2)\delta((E - E_n)/\hbar)$ aszimptotikus viselkedését $t \rightarrow \infty$ esetén, azt kapjuk, hogy

$$W_{M \leftarrow n}(t) \approx \frac{2\pi t}{\hbar} |\bar{V}_{m,n}|^2 \rho_M(E_n). \quad (6.2.105)$$

Innen az időegységre eső átmeneti valószínűség

$$w_{M \leftarrow n} = \frac{dW_{M \leftarrow n}(t)}{dt} \approx \frac{2\pi}{\hbar} |\bar{V}_{m,n}|^2 \rho_M(E_n). \quad (6.2.106)$$

Ez a Fermi-féle „arany szabály”, amelyet itt most az egyazon, ill. közel egyazon energiához tartozó átmenetek valószínűségére kaptunk meg az időfüggő perturbációszámítás első rendjében. Ilyen átmenetek jönnek létre részecske potenciálszórása esetén, amikor a szóródás rugalmas, a részecske energiája megmarad. A kezdeti n állapotot az impulzusa, $\vec{p}_i$ egyértelműen kijelöli, a szórt részecske m állapotát valamilyen $\vec{p}_f$ impulzus jellemzi, miközben a részecske energiája megmarad, $E_i = \frac{p_i^2}{2m} = E_f = \frac{p_f^2}{2m}$. A végállapot impulzusnak csak az iránya lehet tetszőleges. Az összes végállapotok száma, amelyekben a $\vec{p}_f$ impulzus adott irány körüli $d\Omega$ térszögbe esik és energiája $(E, E + dE)$,

$$\rho(E)dE d\Omega = \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} d\Omega. \quad (6.2.107)$$

A kijelölt $d\Omega$ térszögbe időegység alatt történő átmenet, azaz szóródás valószínűsége tehát

$$wd\Omega = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \vec{p}_f | \hat{V} | \vec{p}_i \rangle|^2 \rho(E) d\Omega, \quad (6.2.108)$$

ahol

$$\rho(E)d\Omega = \frac{p^2}{(2\pi\hbar)^3 \frac{dE}{dp}} d\Omega = \frac{mp}{(2\pi\hbar)^3} d\Omega. \quad (6.2.109)$$

Ha figyelembe vesszük hogy korábbi jelölésünk szerint $wd\Omega = j_{sz}d\Omega$, akkor a differenciális szórási hatáskeresztmetszetre az időfüggő perturbációszámítás első rendjében

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{2\pi}{\hbar v_{be}} |\langle \vec{p}_f | \hat{V} | \vec{p}_i \rangle|^2 \rho(E) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar v_{be}} |\langle \vec{p}_f | \hat{V} | \vec{p}_i \rangle|^2 \frac{mp}{(2\pi\hbar)^3} \end{aligned} \quad (6.2.110)$$

adódik. Ez a differenciális szórási hatáskeresztmetszet úgynevezett Born-közelítése.

2. Időben periodikus perturbáció esete, rezonancia-jelenség.

Természetesen érdekes lehet az az eset is, amikor nem azonos, ill. közel azonos energiájú állapotok között jön létre átmenet az időfüggő perturbáció hatására. Alkalmazzuk az átmeneti amplitúdóra az időfüggő perturbációszámítás első rendjében kapott eredményt olyan esetre, amikor a perturbáló potenciál adott körfrekvenciájú, periodikus időfüggéssel rendelkezik. A perturbáló potenciál önadjungált operátorának általános alakja akkor $\hat{V}(t) = g(\hat{v}e^{i\omega t} + \hat{v}^\dagger e^{-i\omega t})$,

ahol $\hat{v}$ időtől független operátor. Innen

$$\begin{aligned}\int_0^t dt' \bar{V}_{m,n}(t') &= g \int_0^t dt' e^{-i\omega_{m,n}t'} [v_{m,n} e^{i\omega t'} + v_{n,m}^* e^{-i\omega t'}] \\ &= -ig \left(\frac{v_{m,n} e^{i(-\omega_{m,n}+\omega)t} - 1}{-\omega_{m,n} + \omega} + v_{n,m}^* \frac{e^{i(-\omega_{m,n}-\omega)t} - 1}{-\omega_{m,n} - \omega} \right),\end{aligned}\quad (6.2.111)$$

ahol bevezettük azt az $\omega_{m,n} = (E_n - E_m)/\hbar$ „előjeles” körfrekvenciát, ami megfelel a perturbálatlan rendszer m -edik és n -edik energianívója közti előjeles energiakülönbségnek, továbbá ahol $v_{m,n} = \langle \phi_m | \hat{v} | \phi_n \rangle$. Az $n \rightarrow m$ átmenet t idő alatti bekövetkezésének valószínűsége

$$w_{m \leftarrow n}(t) = \frac{g^2 |v_{m,n}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{e^{i(-\omega_{m,n}+\omega)t} - 1}{-\omega_{m,n} + \omega} + \frac{e^{i(-\omega_{m,n}-\omega)t} - 1}{-\omega_{m,n} - \omega} \right|^2. \quad (6.2.112)$$

A jobb oldalon az abszolút érték alatti kifejezés első tagjának $\omega = \omega_{m,n}$ esetén, második tagjának $\omega = -\omega_{m,n}$ esetén van jelentős járuléka. Az első tag olyan $n \rightarrow m$ átmeneteknek felel meg, amikor a rendszer a perturbáció hatására energiát sugároz ki és olyan alacsonyabban gerjesztett állapotba kerül, amelynek energiája $2\pi\hbar/t$ bizonytalansággal

$$E_m \approx E_n - \hbar\omega + \mathcal{O}(2\pi\hbar/t). \quad (6.2.113)$$

Értelemszerűen a második tag pedig olyan átmeneteknek felel meg, amikor a rendszer energiát nyel el,

$$E_m \approx E_n + \hbar\omega + \mathcal{O}(2\pi\hbar/t). \quad (6.2.114)$$

Ha az egyes energianívók $\Gamma \neq 0$, nem zérus szélességűek, de t elég nagy ahhoz, hogy $\Gamma \ll 2\pi\hbar/t$ legyen, akkor a két amplitudó nem interferál. Ekkor pl. az emisszió időegységre eső valószínűsége

$$W_{M \leftarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} |v_{m \leftarrow n}|^2 \rho_M(E_M). \quad (6.2.115)$$

Ismét a Fermi-féle arany szabály van érvényben. Teljesen hasonló eredményre jutunk az energiaeinyelés esetén. Összegezve tehát mondhatjuk, hogy a periodikus perturbáció a rendszert rezonanciaszerű energiakisugárzásra, vagy energiaeinyelésre készíti, ha léteznek olyan energiaszintjei, amelyek közötti energiakülönbség $2\pi\hbar/t$ bizonytalansággal megfelelnek perturbáló potenciál körfrekvenciája által meghatározott $\hbar\omega$ energiaadagnak. Az időfüggő perturbációs számítás ezért a foton fogalmától függetlenül adja magyarázatát az energiaszintek közötti energiafelvétellel, ill. leadással járó átmeneteknek.

6.2.2. Nívószélesség és élettartam, bomlási szélesség és felezési idő

Beszéljünk végül arról, hogy miért lehetséges, hogy egy rendszer energiaszintjei keskeny sávokká szélesedjenek ki. Ehhez azt kell figyelembe venni, hogy általában az átmenetet elszenvedő rendszer (nevezzük továbbiakban atomnak) nincsen elszigetelve a környezetétől. Pl. ki van téve a környezet termikus gerjesztéseinek, aminek következtében a TKP-ja nincsen nyugalomban, hanem véletlenszerűen vesz fel különböző nagyságú és irányú sebességeket, ezért az atom a saját nyugalmi rendszerében a Doppler-effektus következtében ω -tól kicsit különbözőnek érzékeli a perturbáció frekvenciáját. Ez a laborrendszerben nyugvó megfigyelő számára ugyanazt jelenti, mintha az energiaszintjei valójában a sebesség-eloszlásnak megfelelően megjelenő keskeny energiasávok lennének (a TKP-i E_n , ill. E_m energiákhoz véletlenszerűen hozzájárul a TKP mozgásának kinetikus energiája). Azt mondjuk, hogy az energiaszintek Doppler-kiszélesedést szenvednek a termikus környezetben. A hőmérséklet csökkentésével a Doppler kiszélesedés szigorúan monoton csökkenthető. Hasonló kiszélesedés az eredménye az elektromágneses mezővel történő (állandóan jelentkező, „kikapcsolhatatlan”) kölcsönhatásnak. Az ebből származó kiszélesedést természetes vonalszélességnek nevezzük. Egyetlen E_n energiaszint tehát a kiszélesedés miatt valójában sok, energiában közeli állapotból álló $E_n \pm \frac{1}{2}\Gamma$ energia-intervallumot kitöltő keskeny energiasávot jelent, általában $\Gamma \ll E_n$.

A periodikus perturbáció hatására bekövetkező emisszió valószínűségére kapott formulánkat alkalmazhatjuk egy E_n energiájú atomi állapot elbomlására. Ennek eredménye, hogy keletkezik egy alacsonyabb, E_m energiájú atom és egy $\hbar\omega$ energiájú foton. A perturbációt ekkor a mindenütt jelenlevő, kvantált elektromágneses mező jelenti. Az energia megmaradása csak $\mathcal{O}(2\pi\hbar/t)$ pontossággal teljesül:

$$E_n = E_m + \hbar\omega + \mathcal{O}(2\pi\hbar/t). \quad (6.2.116)$$

Ez azt jelenti, hogy hiába tudjuk adott kezdeti pillanatban pontosan megmérni az atom energiáját, aztán t idővel később ugyancsak pontosan megmérni a végtermékek E_m és $\hbar\omega$ energiáit, a két, egymást t időközzel követő energiamérés elvileg nem tudja az energiamegmaradást pontosabban ellenőrizni, mint a δE energiabizonytalanság, amelyre fennáll a

$$\delta E t \sim \hbar \quad (6.2.117)$$

„határozatlansági reláció. Bomlási folyamat esetén a $\tau = \hbar/\Gamma$ időtartamot az állapot élettartamának nevezzük. Meg lehet mutatni, hogy ez lényegében az állapot bomlástörvényből ismert felezési ideje.

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 határfeltételek⁹² miatt csak diszkrét értékeket vehet fel, mégpedig olyan módon, hogy téglatest alakú üregben valamennyi, L_j ($j = 1, 2, 3$) hosszúságú élre a hullámvektor megfelelő k_j ($j = 1, 2, 3$) Descartes⁹³-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:

$$\vec{k} = \frac{\pi}{L} (n_x, \quad n_y, \quad n_z). \quad (\text{A.2})$$

Minden $\vec{k}$ hullámvektorral jellemzett állóhullám két független, egymásra merőleges rezgés szuperpozíciója, mert az elektromos térerősség merőleges a hullámvektorra és

⁹²A határfeltétel az, hogy az elektromos térerősség érintőirányú komponense, ill. a mágneses indukció normális irányú komponense zérus a vezető üregének felületén.

⁹³René Cartesius Descartes (1596-1650, francia) filozófus, fizikus és matematikus. Nevéhez fűződik a fénytörés törvénye, a Snellius-Descartes-törvény. Fizikai világképének maradandó eleme az a felismerés, hogy a mozgás kölcsönhatás eredménye, amelyet azonban a testek közvetlen érintkezése révén megvalósuló közelhatásként képzelt el.

a merőleges síkban két független irány létezik. Jelöljük az $\vec{e}_k^\alpha$ ($\alpha = 1, 2$) 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:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \sum_{n_x, n_y, n_z} \vec{E}_k(\vec{r}, t) = \sum_{n_x, n_y, n_z} \sum_{\alpha=1,2} \vec{e}_k^\alpha E_k^\alpha(\vec{r}, t). \quad (\text{A.4})$$

Ez a térerősségnek a diszkrét $\vec{k}$ -módusok szerinti Fourier-sorfejtése. A Maxwell-egyenletek következménye, hogy a térerősség eleget tesz vákuumban, forrásmentes esetben a

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} - \Delta \vec{E} = 0 \quad (\text{A.5})$$

homogén hullámeqyenletnek. Helyettesítsük be ide az $E_k^\alpha(\vec{r}, t) = E_k^\alpha(t) e^{-i\vec{k}\vec{r}}$ alakot. Akkor azt találjuk, hogy az $E_k^\alpha(t)$ időtől függő módus-amplitúdók lineáris harmonikus oszcillátorok, mert a

$$\frac{\partial^2 E_k^\alpha(t)}{\partial t^2} + \omega_k^2 E_k^\alpha(t) = 0 \quad (\text{A.6})$$

egyenletnek tesznek eleget, ahol

$$\omega_k^2 = c^2 \vec{k}^2 \quad (\text{A.7})$$

a $\vec{k}$ -módus körfrekvenciájának a négyzete. A klasszikus elektrodinamika keretében azt is be lehet látni, hogy az elektromágneses mező energiasűrűsége az egyes állóhullámú módusok energiasűrűségeinek az összege⁹⁴:

$$u = \frac{1}{8\pi} \vec{E}^2 = \sum_{n_x, n_y, n_z} \sum_{\alpha=1,2} \frac{1}{8\pi} |E_k^\alpha|^2. \quad (\text{A.8})$$

Ez azt jelenti, hogy az elektromágneses mező energiája a vezető üregében úgy tekinthető, mint független lineáris harmonikus oszcillátorok energiáinak az összege. 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 amplitúdója 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 fémmelel. A számolásban Planck⁹⁵ eljárását fogjuk követni. Egyszerűbben tudunk számolni, ha feltesszük, hogy egy lineáris oszcillátor energiája csak valamilyen ϵ_0 energiaadag egész számú többszöröse, $\epsilon_n = n\epsilon_0$

⁹⁴Valójában az energiasűrűség időátlagáról van szó, amelyet pl. kocka alakú üregtér fogat esetén az alaplómódus periódusidejére kell képezni. Az időátlagolást a felülvonás jelzi. A mágneses indukció és az elektromos térerősség járuléka azonos, $\frac{1}{16\pi} \vec{B}^2 = \frac{1}{16\pi} \vec{E}^2$

⁹⁵Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858-1947, német) 1918-ban fizikai Nobel-díjat kapott a Fizika fejlődéséért az energiakvantum felfedezésével tett szolgálataiért.

lehet, ahol $n = 0, 1, 2, \dots$ egész szám, ϵ_0 -al pedig a számolás végén nullához fogunk tartani. Boltzmanntól⁹⁶ származik annak a felismerése, hogy egy részecske, egy oszcillátor, ha egyensúlyban van a T hőmérsékletű környezettel, akkor

$$w_n = \frac{e^{\frac{-\epsilon_n}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{\frac{-\epsilon_n}{k_B T}}} \quad (\text{A.9})$$

valószínűséggel tölti be az ϵ_n energiájú állapotát. Ha ez így van, akkor egy oszcillátor átlagos energiája

$$\bar{\epsilon} = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n w_n = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n e^{\frac{-\epsilon_n}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{\frac{-\epsilon_n}{k_B T}}}. \quad (\text{A.10})$$

Ennek kiszámolásához induljunk ki a mértani sor

$$\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \quad (\text{A.11})$$

képletéből és deriváljuk azt az x kvóciens szerint:

$$\frac{1}{(1-x)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} n x^{n-1}. \quad (\text{A.12})$$

Vegyük ezeket a sorokat $x = e^{\frac{-\epsilon_0}{k_B T}}$ helyettesítéssel, akkor

$$\bar{\epsilon} = \epsilon_0 \frac{\frac{1}{(1-x)^2}}{\frac{1}{1-x}} x = \frac{\epsilon_0 e^{\frac{-\epsilon_0}{k_B T}}}{1 - e^{\frac{-\epsilon_0}{k_B T}}} = \frac{\epsilon_0}{e^{\frac{\epsilon_0}{k_B T}} - 1} \xrightarrow{\epsilon_0 \rightarrow 0} k_B T \quad (\text{A.13})$$

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-koordináta-rendszerben olyan pontok felelnek meg, amelyek egységnyi rácsállandójú kockarács rácspontjai, és amelyek belül helyezkednek el az $R = \frac{\omega L}{\pi c}$ sugarú gömbön. Ezek száma

$$N_\omega = \frac{\frac{4\pi R^3}{3}}{1^3} = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{L}{\pi c} \right)^3 \omega^3. \quad (\text{A.14})$$

⁹⁶Ludwig Boltzmann (1844-1906, osztrák) fizikus. Kísérletileg igazolta a Maxwell-elmélet által megkövetelt kapcsolatot a fény örésmutatója, a relatív dielektromos állandó és a relatív mágneses permeabilitás között. További fontos eredményei: az entrópia és a termodinamikai valószínűség kapcsolatának felismerése, a Maxwell-Boltzmann-eloszlás és a feketetest-sugárzásra vonatkozó Stefan-Boltzmann-törvény elméleti megalapozása.

Ide még be kell írjuk a 2 szorzótényezőt, amivel figyelembe vesszük, hogy minden módus kétféle polarizációs irányban valósulhat meg. Innen deriválással adódik, hogy az $(\omega, \omega + d\omega)$ infinitezimális intervallumban található módusok száma,

$$dN_\omega \equiv g_\omega d\omega = 8\pi \left(\frac{L}{\pi c}\right)^3 \omega^2 d\omega \quad (\text{A.15})$$

növekvő körfrekvenciával négyzetesen nő. Itt g_ω az ún. állapotsűrűség, az állóhullámú módusok körfrekvencia szerinti sűrűsége.

Mivel az üregben az állóhullámú módusok frekvencia szerinti sűrűsége növekvő frekvenciával négyzetesen nő, és minden módus átlagosan $k_B T$ energiát hordoz, azért a klasszikus fizika szerint a feketest-sugárzás energiasűrűsége,

$$u = \frac{1}{L^3} k_B T \int_0^\infty g_\omega d\omega \rightarrow \infty, \quad (\text{A.16})$$

végtelen nagynak adódik. Ez az ún. **Rayleigh⁹⁷-Jeans⁹⁸-féle ultraibolya katasztrófa**. Ha ez igaz lenne, akkor a feketetest üregéből végtelen nagy energia lenne kinyerhető.

Planck 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 üregben jelenlevő elektromágneses sugárzás ω körfrekvenciájú módusainak megfelelő lineáris harmonikus oszcillátorok nem vehetnek fel tetszőleges energiát a T hőmérsékletű üreg anyagának atomjaitól, hanem csak $\epsilon_0 = \hbar\omega$ energiaadagokat. Ezért az ω körfrekvenciájú oszcillátor ϵ_n energiája csak az $\epsilon_0 = \hbar\omega$ energiaadag egész számú többszöröse lehet, $\epsilon_n = n\epsilon_0$, ($n = 0, 1, 2, \dots$). Valóban, ekkor a fenti számolás változatlan, csupán nem szabad az $\epsilon_0 \rightarrow 0$ határértéket venni. A T hőmérsékletű környezetével termikus egyensúlyban lévő, ω körfrekvenciájú oszcillátor átlagos energiája**

$$\bar{\epsilon}_k = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}. \quad (\text{A.17})$$

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

$$\bar{\epsilon}_k \approx \hbar\omega e^{\frac{-\hbar\omega}{k_B T}}, \quad (\text{A.18})$$

ami növekvő körfrekvenciával exponenciálisan csökken. Az $(\omega, \omega + d\omega)$ infinitezimális intervallumban található módusok az energiasűrűséghez tehát

$$du = \frac{1}{L^3} g_\omega \bar{\epsilon}_k d\omega = \frac{1}{L^3} \frac{\hbar\omega g_\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} d\omega \equiv \rho(\omega) d\omega \quad (\text{A.19})$$

⁹⁷Lord (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.

⁹⁸Sir James Hopwood Jeans (1877-1946, angol) matematikus, fizikus, csillagász.

járulékot adnak. Az összes módus együttes járuléka tehát az energiasűrűséghez

$$\begin{aligned} u &= \int_0^\infty \frac{1}{L^3} g_\omega \bar{\epsilon}_k d\omega \\ &= 8\pi \left(\frac{1}{\pi c} \right)^3 \int_0^\infty \frac{\hbar \omega^3}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1} d\omega = \text{const.} T^4 < \infty \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

véges érték, amely arányos a hőmérséklet negyedik hatványával⁹⁹. Ez a feketetest sugárzásának Stefan¹⁰⁰-Boltzmann-féle törvénye. A kísérletek nemcsak ezt, hanem a Planck-féle sugárzási törvényt,

$$\rho(\omega) d\omega = 8\pi \left(\frac{1}{\pi c} \right)^3 \frac{\hbar \omega^3}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1} d\omega \quad (\text{A.22})$$

is fényesen igazolják. Utóbbi az egységnyi körfrekvencia-intervallumban adja meg az energia sűrűségét a feketetest-sugárzásban. Végül a Wien¹⁰¹-féle eltolódási törvény is kiolvasható belőle, ha megkeressük, hol van a $\rho(\omega)$ függvény maximuma. Az az ω_m körfrekvencia, amelyhez tartozó módusok maximálisan járulnak hozzá az energiasűrűséghez, azaz amely frekvencián maximális a feketetest sugárzásának $c\rho(\omega)$ intenzitása, arányos a feketetest hőmérsékletével, azaz $\frac{\hbar \omega_m}{k_B T} = \text{áll.}$ ¹⁰².

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 $\hbar\omega$ energiaadag 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 megfigyelések¹⁰³ azt mutatják, hogy **az egész Világegyetemből izotróp módon érkezik hozzánk elektromágneses háttérsugárzás**, az ún. **kozmikus háttérsugárzás. A kozmikus háttérsugárzás intenzitásának frekvencia szerinti**

⁹⁹Végezzük el az $\omega \rightarrow x = \frac{\hbar \omega}{k_B T}$ változó-transzformációt, akkor

$$\int_0^\infty \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1} \propto T^4 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \propto T^4, \quad (\text{A.21})$$

mert az integrál konvergens hiszen $x \rightarrow \infty$ esetén az integrandus $x^3 e^{-x}$ szerint minden hatványfüggvényénél gyorsabban tart nullához.

¹⁰⁰Joseph Stefan (1835-1893, osztrák) fizikus, a kinetikus gázelmélet egyik megalapozója.

¹⁰¹Wilhelm Carl Werner Otto Fritz Franz Wien (1864-1928, német) 1911-ben fizikai Nobel-díjat kapott a hősugárzás törvényeivel kapcsolatos felfedezéseiért.

¹⁰²A szélsőérték szükséges feltétele $\frac{\partial \rho(\omega)}{\partial \omega} = 0$, ahonnan az $x = \frac{\hbar \omega}{k_B T}$ helyettesítés után $e^x = \frac{3}{3-x}$ adódik a szélsőérték helyre. Az $x = 0$ helyen minimum, a numerikusan megkereshető x_m helyen maximum van. A maximális intenzitású sugárzás tehát azon az ω_m körfrekvencián történik, amelyre $\omega_m = x_m \frac{k_B T}{\hbar}$. Mivel $\omega_m = c \frac{2\pi}{\lambda_m}$, azért a megfelelő hullámhosszra $\lambda_m T = \frac{\hbar c}{k_B T} = x_m \approx 2,9 \times 10^{-3} \text{ Km}$.

¹⁰³Arno 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.

eloszlása megegyezik egy olyan Planck-eloszlással, amely termikus egyensúlyban levő, $T = 2,7$ K hőmérsékletű feketetest-sugárzáshoz tartozik. A jelenséget úgy magyarázzuk, hogy a Világegyetem fejlődése során volt egy pillanat, amikor a még szabadon jelenlevő, elektromosan töltött elektronok, protonok és az elektromágneses sugárzás egymással termikus egyensúlyba kerültek. Ezután a Világegyetem tágulása következtében az anyag hűlni kezdett és a töltött részecskék semleges atomokat alkottak. Ekkor lényegében megszűnt az elektromágneses térnek a kondenzált anyaggal való kölcsönhatása. A visszamaradt, annak idején az anyaggal termikus egyensúlyban levő elektromágneses sugárzás azóta szabadon terjed a még mindig táguló Világegyetemben és ezt észleljük kozmikus háttérsugárzásként. A kozmikus háttérsugárzás jelenleg észlelt hőmérsékletéből az ún. gravitációs vöröseltolódás alapján vissza lehet következtetni arra a hőmérsékletre, amellyel a Világegyetem az elektromágneses sugárzásnak az anyagról való lecsatolódása pillanatában rendelkezett. Abból pedig, hogy a különböző irányokból hozzánk érkező kozmikus háttérsugárzás hőmérséklete kb. $\frac{\Delta T}{T} \approx 10^{-4}$ nagyságrendű relatív ingadozásokat mutat, arra lehet következtetni, hogy a tér lapos, azaz nem görbült, euklideszi geometriájú a Világegyetem méretskáláján. Ettől eltérések a tapasztalat szerint csak „kis” méretekben, lokálisan vannak pl. csillagok, feketelyukak közelében.

2. **A fotoeffektus. A fényelektromos jelenség, idegen nevén a fotoeffektus lényege, hogy a fémek felületét fénnel megvilágítva a fémből elektronok lépnek ki.** A fényelektromos jelenség felfedezése H. Hertz¹⁰⁴, Hallwachs¹⁰⁵ és Lénárd¹⁰⁶ nevéhez fűződik. A kísérletekben monokromatikus ultraibolya vagy Röntgen-sugárzást bocsátottak fémek felületére, és azt tapasztalták, 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, $E \propto \nu$.** A jelenségre Einstein¹⁰⁷ az alábbi összefüggés felírásával adott magyarázatot:

$$h\nu = E + W, \quad (\text{A.23})$$

ahol W az adott fémre jellemző állandó. Einstein¹⁰⁸ az utóbbi összefüggést

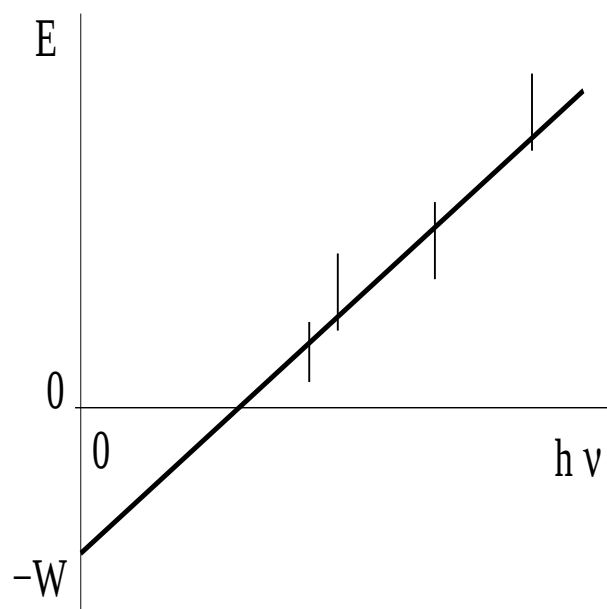
¹⁰⁴Heinrich Rudolf Hertz (1857-1894, német fizikus) fedezte fel a rádióhullámokat és a fényelektromos jelenséget.

¹⁰⁵Wilhelm Hallwachs (1859-1922, német fizikus) ismerte fel a később róla elnevezett Hallwachshatást a fényelektromos jelenségben.

¹⁰⁶Philipp Eduard Anton von Lenard (1862-1947, magyar-német) kimutatta, hogy a fényelektromos jelenség során elektronok lépnek ki a fémből; a katódsugarak kutatásáért 1905-ben fizikai Nobel-díjat kapott.

¹⁰⁷Albert Einstein (1879-1955, német-amerikai) 1921-ben fizikai Nobel-díjat kapott az Elméleti Fizika terén kifejtett szolgálataiért, különös tekintettel a fotoeffektus törvényének felfedezésére.

¹⁰⁸Albert Einstein (1879-1955, német-amerikai) 1921-ben fizikai Nobel-díjat kapott az Elméleti Fizika terén kifejtett szolgálataiért, különös tekintettel a fotoeffektus törvényének felfedezésére.



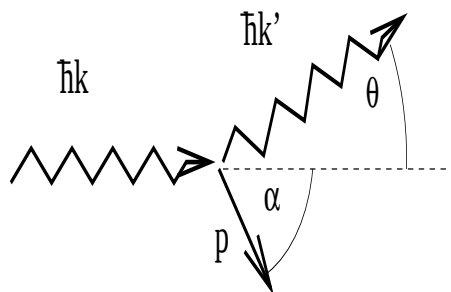
5. ábra. Fotoeffektus során kilépő elektronok kinetikus energiája a monokromatikus besugárzó fény frekvenciájának függvényében.

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. Az Einstein által felállított (A.23) összefüggést Millikan¹⁰⁹ igazolta később kísérletileg, aki azt is megmutatta, hogy az (A.23) összefüggésben a fénykvantumban szereplő arányossági tényező pontosan megegyezik a Planck-feltevésben szereplő arányossági tényezővel.

3. Compton-szórás. Ha Röntgen¹¹⁰-sugárzás szóródik atomon, akkor frek-

¹⁰⁹Robert Andrews Millikan (1868-1953, amerikai fizikus) 1923-ban fizikai Nobel-díjat kapott az elektron töltésének megméréseért és a fotoelektromos jelenségre vonatkozó döntő jelentőségű kísérleteiért.

¹¹⁰Wilhelm 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.



6. ábra. A Compton-szórás sematikus ábrája.

vencia-eltolódást figyelhetünk meg, amelynek értéke függ a szórási szögtől. Ez a Compton¹¹¹-szórás jelensége, amelyet Compton fedezett fel és Compton és Debye¹¹² a foton fogalmának segítségével értelmeztek.

A kísérletben azért használunk Röntgen-sugárzást, hogy az atomi elektront kezdetben nyugalomban levő, szabad elektronnak lehessen tekinteni. Essen $\vec{k}$ hullámvektorú, $\omega = kc$ körfrekvenciájú Röntgen-sugárzás az m_e nyugalmi tömegű, kezdetben közelítőleg zérus impulzusú elektronra. Legyen az ütközés után az elektron impulzusa $\vec{p} = \frac{m_e \vec{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$, a Röntgen-sugárzás hullámvektora

$\vec{k}'$, körfrekvenciája $\omega' = k'c$. Legyen a Röntgen-sugárzás szórási szöge θ , az elektron $\vec{p}$ impulzusának a $\vec{k}$ hullámvektorral bezárt szöge α (lásd 6. ábra). **Ha azzal a feltevéssel élünk, hogy a Röntgen-sugárzás egyszerre hordozza az összetartozó $\hbar\omega$ energia- és a $\hbar\vec{k}$ impulzusadagot**, akkor az energia- és az impulzusmegmaradás törvénye:

$$\begin{aligned}\hbar\omega + m_e c^2 &= \hbar\omega' + \frac{m_e c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \\ \hbar\vec{k} &= \hbar\vec{k}' + \frac{m_e \vec{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}.\end{aligned}\tag{A.24}$$

Bontsuk az impulzusokat a bejövő $\vec{k}$ iránnyal párhuzamos és arra merőleges

¹¹¹Arthur 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.

¹¹²Petrus 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.

komponensekre:

$$\begin{aligned}\hbar\frac{\omega}{c} &= \hbar\frac{\omega'}{c} \cos \theta + \frac{m_e v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \cos \alpha, \\ 0 &= \hbar\frac{\omega'}{c} \sin \theta - \frac{m_e v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \sin \alpha.\end{aligned}\tag{A.25}$$

A második egyenlet segítségével tüntessük el α -t az első egyenletből:

$$\begin{aligned}\left(\hbar\frac{\omega}{c} - \hbar\frac{\omega'}{c} \cos \theta\right)^2 + \left(\hbar\frac{\omega'}{c} \sin \theta\right)^2 &= \left(\frac{m_e v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}\right)^2, \\ \left(\hbar\frac{\omega}{c}\right)^2 + \left(\hbar\frac{\omega'}{c}\right)^2 - 2\hbar\frac{\omega}{c}\hbar\frac{\omega'}{c} \cos \theta &= \left(\frac{m_e v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}\right)^2, \\ \left(\hbar\frac{\omega}{c} - \hbar\frac{\omega'}{c}\right)^2 + 4\hbar\frac{\omega}{c}\hbar\frac{\omega'}{c} \sin^2 \frac{\theta}{2} &= \left(\frac{m_e v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}\right)^2.\end{aligned}\tag{A.26}$$

Végül az energiamegmaradás törvényének segítségével tüntessük el az elektron v sebességét:

$$\begin{aligned}\left(\frac{m_e v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}\right)^2 c^2 &= \left(\frac{m_e c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}\right)^2 - m_e^2 c^4 \\ &= \left(\hbar\omega - \hbar\omega' + m_e c^2\right)^2 - m_e^2 c^4 \\ &= \left(\hbar\omega - \hbar\omega'\right)^2 + 2\left(\hbar\omega - \hbar\omega'\right)m_e c^2,\end{aligned}\tag{A.27}$$

úgyhogy

$$\begin{aligned}\left(\hbar\omega - \hbar\omega'\right)^2 + 4\hbar^2\omega\omega' \sin^2 \frac{\theta}{2} &= \left(\hbar\omega - \hbar\omega'\right)^2 + 2\left(\hbar\omega - \hbar\omega'\right)m_e c^2, \\ \omega - \omega' &= \frac{2\hbar}{m_e c^2}\omega\omega' \sin^2 \frac{\theta}{2}\end{aligned}\tag{A.28}$$

adódik a Röntgen-sugárzás frekvenciájának eltolódására. Ebből látjuk, hogy a szórt sugárzás frekvenciája kisebb, mint a bejövő sugárzásé. A frekvencia-eltolódás előreszórás esetén zérus, 180° fokos visszaszórás esetén pedig maximális.

Szokásosabb a frekvenciaeltolódás helyett a hullámhossz növekedését megadni:

$$\lambda' - \lambda = 4\pi \frac{\hbar}{m_e c} \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (\text{A.29})$$

Az itt fellépő

$$\lambda_c = \frac{2\pi\hbar}{m_e c} = \frac{h}{m_e c} \quad (\text{A.30})$$

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.

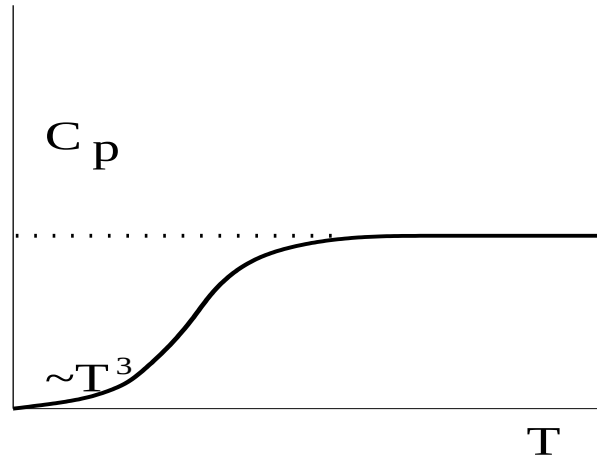
A szilárdtestek fajhője széles hőmérsékleti tartományban állandó, eleget tesz az ún. Dulong-Petit-törvénynek¹¹³. Alacsony hőmérsékleten azonban a szilárdtestek fajhője nem független a hőmérséklettől, hanem $c_p \propto T^3$ hőmérséklet-függést mutat (ld. 7. ábra).

A szilárdtestek alacsony hőmérsékleti fajhőjének hőmérséklet-függését azon feltevés alapján sikerült megérteni, hogy a fémek alkotó kristályrács kollektív rugalmas kisrezgései, a rugalmas állóhullámok kvantáltak: nem vehetnek fel és adhatnak le tetszőleges értékű energiát, hanem csak a ν frekvenciájuk által meghatározott diszkrét értékű energiadagokat, a $h\nu$ energiaadag egész számszorosát. 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.

¹¹³Pierre 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 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

$$c_p = \frac{1}{V} \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{1}{V} \text{módusok száma} \cdot k_B, \quad (\text{A.31})$$

ami független a hőmérséklettől. Ez a Dulong-Petit-törvény.



7. ábra. Szilárdtestek fajhőjének hőmérséklet-függése.

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 pontrészcskékre vonatkozó Einstein-féle energia, impulzus és nyugalmi tömeg közötti összefüggést kielégítő részecske interferenciára képes önmagával.

1. *Davisson és Germer kísérlete.* A Davisson¹¹⁴-Germer¹¹⁵-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 kristállysík, amelyen az egymástól d távolságra elhelyezkedő atomokon szóródik a felületre merőlegesen beeső síkhullám (ld. 8. ábra). Két, szomszédos atom által szórt hullám útkülönbsége $d \sin \theta$, ha a beesési merőlegeshez képest θ szög alatt szórt hullámot nézzük. Az elhajlási képben azokban a θ_n irányokban kapunk intenzitás-maximumot, amelyekre a

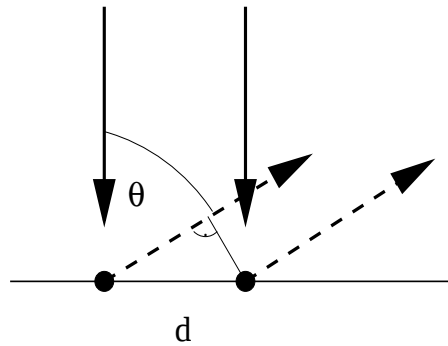
$$d \sin \theta_n = n\lambda \quad (\text{A.32})$$

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

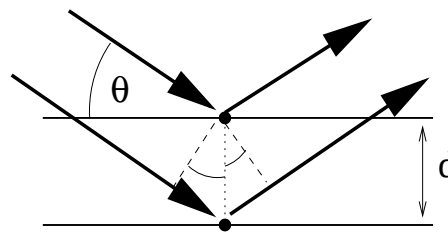
$$d \sin \theta_n = n \frac{h}{p}. \quad (\text{A.33})$$

¹¹⁴Az 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).

¹¹⁵Lester Halbert Germer (1896-1971, amerikai) fizikus Davissonnal együtt bebizonyította az anyag részecske-hullám dualitását, ami alapvető jelentőségű volt az elektronmikroszkóp kifejlesztése szempontjából.



8. ábra. A Davisson-Germer-kísérlet sematikus ábrája.



9. ábra. Segédábra a Bragg-feltétel megfogalmazásához.

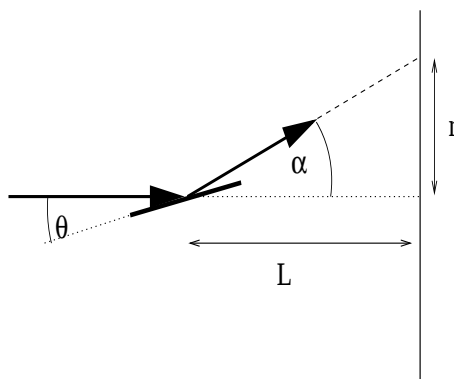
Ebből arra lehet következtetni, hogy a p impulzusú elektron ebben a kísérletben ugyanúgy viselkedik, mintha $\lambda = h/p$ hullámhosszú klasszikus hullám lenne.

2. *Thomson kísérlete.* Thomson¹¹⁶ megmutatta, hogy a Debye-Scherrer¹¹⁷-módszerben adott impulzusú elektronnyalábot alkalmazva monokromatikus Röntgen-sugárzás helyett, ugyanolyan elhajlási képet kapunk, mintha megfelelő, $\lambda = \frac{h}{p}$ hullámhosszú monokromatikus elektromágneses hullámot használnánk.

A **Debye-Scherrer-módszer** lényege, hogy ha monokromatikus síkhullám esik kristályporból préselt mintára, akkor az egyes kristályszemcsék térbeli rácsot képeznek. Egy-egy szemcsén az elhajlási kép annak köszönhetően jön létre, hogy amikor a beeső síkhullámnak két szomszédos, egymástól d távolságra levő, párhuzamos kristálysíkról visszavert része találkozik, akkor közöttük $2d \sin \theta$ útkülönbség van, ahol θ a beeső nyaláb és a kristálysíkok szöge. Amikor ezzel az állandó útkülönbséggel a két síkról visszavert síkhullám szuperponálódik, akkor intenzitás-maximumot a

¹¹⁶Sir 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.

¹¹⁷Paul Scherrer (1890-1969, svájci) fizikus, aki azokkal a kutatásaival vált nemzetközileg elismertté, amelyeket a Röntgen-sugárzásnak kristályokon, folyadékokon gázokon való szórása terén végzett.



10. ábra. A Debye-Sherrer-módszer sematikus ábrája.

Wulf¹¹⁸ és Bragg¹¹⁹-féle feltétel teljesülése esetén kapunk,

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (\text{A.34})$$

ahol λ a hullámhossz és $n = 1, 2, \dots$ (ld. 9. ábra).

Mivel a kristályporból préselt mintában a kristályszemcsék orientációja teljesen véletlenszerű, ezért az elhajlási kép forgásszimmetrikus a beeső hullám hullámvektorára nézve. Az elhajlási kép koncentrikus körgyűrűkből áll: sötét és világos gyűrűk követik egymást a beeső nyaláb tengelyétől radiális irányban kifelé haladva a nyalábra merőleges megfigyelési síkban. Legyen a megfigyelési sík a mintától L távolságra, és nézzük az intenzitást a beeső nyaláb tengelyétől r távolságra. Itt a $\tan \alpha = r/L$ irányba szóródott hullámok ineterferenciáját észleljük. Ezek azok, amelyek a beeső nyaláb irányával $\frac{1}{2}\alpha = \theta$ szöget bezáró kristálsíkokról 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,

$$2d \frac{r_n}{2L} = n\lambda, \implies r_n = n\lambda \frac{L}{d} \quad (\text{A.35})$$

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 Broglie¹²⁰ 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.

¹¹⁸Theodor Wulf (1868-1946, német) fizikus és jezsuita páter, aki a saját maga által tervezett és épített elektrométerrel 1910-ben felfedezte a kozmikus sugárzást.

¹¹⁹Sir 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.

¹²⁰Prince Louis-Victor Pierre Raymond de Broglie (1892-1987, francia) az 1929. évi fizikai Nobel-díj kitüntetője, a díjat az elektronok hullámtermészetének felfedezéséért kapta.

Ezekre majd később visszatérünk. Itt néhány olyan tapasztalatra hívom fel a figyelmet, amelyekből arra lehetett következtetni, hogy az atomok diszkrét gerjesztési energiákkal rendelkeznek.

1. *Az atomi spektrumok vonalas szerkezete. A Ritz-féle kombinációs elv. Az atomok által kibocsátott elektromágneses sugárzás tanulmányozása révén arra jöttek rá, hogy minden atom rá jellemző frekvenciákon bocsát ki elektromágneses sugárzást. Ezekhez a spektrumvonalakhoz tartozó energiák pedig sorozatokba rendezhetők, mint pl. a hidrogén-atom esetén a Balmer¹²¹-sorozat.* A sorozatba-rendezés azon alapul, hogy minden észlelt sugárzási frekvenciát elő lehet állítani olyan, szigorúan monoton csökkenő számsorozat 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 Ritz¹²²-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 várhatók újabb spektrumvonalak. Az elv hátterében az a feltevés áll, hogy minden spektrumvonalhoz tartozó $\hbar\omega$ energia két term, azaz két energia különbségeként állítható elő.

A magyarázatot akkor kapjuk meg, ha feltesszük, hogy az atomoknak diszkrét E_n energiájú állapotai vannak. Az $\omega_{n,m}$ körfrekvenciájú elektromágneses sugárzás kibocsátása annak a következménye, hogy az atom a magasabb energiájú E_m gerjesztett állapotából az alacsonyabban gerjesztett $E_n < E_m$ energiájú állapotába megy át; ekkor

$$\hbar\omega_{n,m} = E_m - E_n. \quad (\text{A.36})$$

Ha megtaláltuk az $\omega_{m,l}$ spektrumvonalat és utána a $\omega_{n,l} = \omega_{n,m} + \omega_{m,l}$ összeg-frekvenciának 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 Bohr¹²³-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 pályára

¹²¹Johann Jacob Balmer (1825-1898, svájci) matematikus és fizikus a spektrumvonalak rendszerezése terén a kvantummechanika kifejlődése szempontjából alapvető fontosságú felismerést tett.

¹²²Walter 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.

¹²³Niels 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.

kerületére, mert így tud elektronállóhullám kialakulni:

$$n\frac{h}{p} = 2r\pi, \quad (\text{A.37})$$

ahol p az elektron impulzusának nagysága, r a körpálya sugara. Másrészt a Coulomb¹²⁴-erőnek kell biztosítania, hogy az elektron körpályán maradjon:

$$m\frac{v^2}{r} = m\frac{p^2}{m^2r} = \frac{p^2}{mr} = \frac{Ze^2}{r^2}, \quad (\text{A.38})$$

ahol m , ill. e az elektron nyugalmi tömege, ill. töltése, Z az atom rendszáma. Így

$$p = \frac{n\hbar}{r}, \quad p^2 = \frac{mZe^2}{r}, \quad (\text{A.39})$$

ahonnan az elektron impulzusa, az elektron pályájának sugara és az elektron energiája diszkrétnek adódik:

$$\begin{aligned} p_n &= \frac{mZe^2}{n\hbar}, \\ r_n &= \frac{n^2\hbar^2}{mZe^2}, \\ E_n &= -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{r_n} = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2} \equiv -R\frac{1}{n^2}. \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

Itt R az ún. Rydberg¹²⁵-állandó. Az atomi spektrumvonalak olyan elektromágneses sugárzást jelentenek, ami akkor következik be, amikor az elektron egy magasabb energiaszintről alacsonyabb energiaszintre kerül. Az energiakülönbség úgy jelenik meg, mint a kibocsátott sugárzás energiakvantuma:

$$\hbar\omega = E_{n'} - E_n = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right), \quad n' > n. \quad (\text{A.41})$$

Ez a modell helyesen magyarázta a H-atom színeképvonalait, nem adott azonban helyes magyarázatot a bonyolultabb atomok színeképvonalaira.

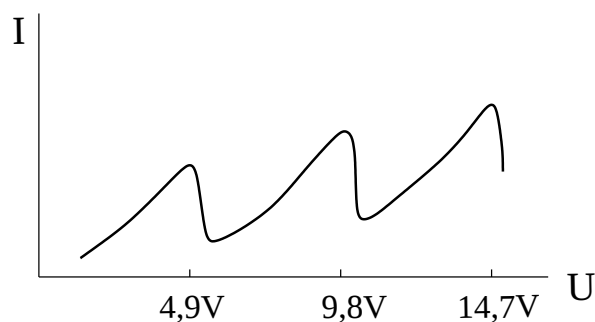
2. **A Franck-Hertz kísérlet.** A Franck és Hertz¹²⁶ által végzett kísérlet annak közvetlen bizonyítására szolgál, hogy az atomok diszkrét energiaadagokkal gerjeszthetők, azaz hogy az atomi állapotok energiái diszkrétek.

A kísérletben egy elektroncsövet higany-gőzzel töltenek meg, majd felveszik a feszültség-áram karakterisztikáját. A tapasztalat az, hogy az áram a feszültség függvényében szigorúan monoton növekszik, majd +4,9 V anódfeszültségnél visszaesik; aztán újra növekedni kezd és +9,8 V feszültségnél újra visszaesik. Végül a feszültséget tovább növelve, újabb növekedési szakasz és +14,7 V feszültségnél egy újabb visszaesés is megfigyelhető. A jelenséget azzal lehet magyarázni, hogy a higany-atomnak

¹²⁴Charles Auguste de Coulomb (1736-1806, francia) fizikus méréseivel igazolta a róla elnevezett Coulomb-törvényt.

¹²⁵Johannes Robert Rydberg (1854-1919, svéd) fizikus vezette be a termék fogalmát.

¹²⁶Az 1925. évi fizikai Nobel-díjat 1926-ban megosztva kapta meg James Franck (1882-1964, német-amerikai) és Gustav Ludwig Hertz (1887-1975, német) azoknak a törvényeknek a felfedezéséért, amelyek az elektronnak az atommal történő ütközését meghatározzák.



11. ábra. A Franck-Hertz-kísérletben megfigyelhető feszültség-áram karakterisztika.

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.

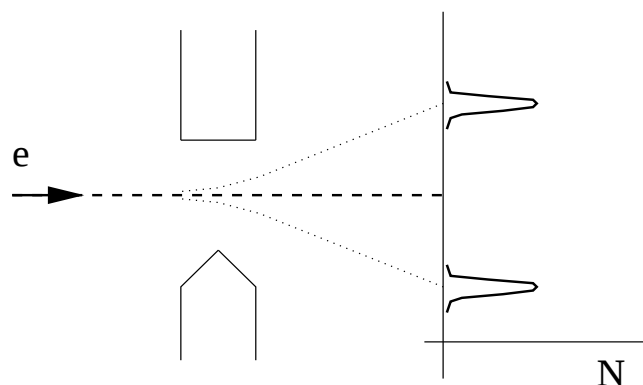
A.1.4. Az elektron spinjének felfedezése

Az elektron spinjének létezését, az elektron spinjének és mágneses momentumának kapcsolatát és az impulzusmomentum iránykvantáltságát igazoló kísérletekről beszélünk.

1. *A Stern és Gerlach kísérlete.* Stern¹²⁷ és Gerlach¹²⁸ azt igazolták, hogy a mágneses dipólmomentum adott irányú vetülete kvantált. A kísérletben

¹²⁷Az 1943. évi fizikai Nobel-díjat 1944-ben adták át Otto Sternnek (1888-1969, német) egyrészt azért a hozzájárulásért a fizika fejlődéséhez, amit a molekula-nyalábok módszerének kifejlesztése terén tett, másrészt a proton mágneses momentumának a felfedezéséért.

¹²⁸Walther 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.



12. ábra. A Stern-Gerlach-kísérlet szemléltetése. A bejövő elektronnyaláb a mágnespofák közti inhomogén mágneses térben két nyalábra válik szét. A fel-fogó ernyőn a bejövő nyaláb tengelyére szimmetrikusan két helyen kapunk az N beütésszámban maximumot.

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 $F_z \in [-\mu \frac{dB_z}{dz}, \mu \frac{dB_z}{dz}]$ 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 másokban azok, amelyeknek a dipólmomentuma a z -tengelyhez képest „lefelé” (negatív irányban) mutat. Akárhogyan forgatjuk az inhomogén mágneses teret létesítő mágnespofákat a nyaláb tengelye körül, mindig ugyanazt tapasztaljuk.

A Stern-Gerlach-kísérletből arra lehet következtetni, hogy a mágneses dipólmomentum tetszőleges irányú tengelyre vett vetülete kvantált. Az ezüstatomok esetén csak két értéket vehet fel.

Az alább ismertetésre kerülő Einstein-de Haas¹²⁹-kísérlet eredményét is figyelembe véve, azt lehet mondani, hogy az ezüstatomok mágneses momentuma csak egyet-

¹²⁹Wander 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.

len 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 faktorialis különbözik a mágneses momentum és az impulzusmomentum arányossági tényezője.

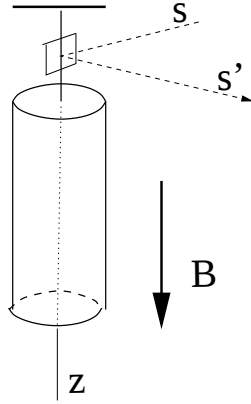
A kísérletben egy ferromágneses hengert vettek, amelyet torziós szálon függőlegesen felfüggesztettek a hossz tengelye, a z -tengely mentén. Kezdetben a hengerben a mágneses momentumok, amelyek atomonként egy-egy darab elektron saját mágneses momentumától származnak, irányukat tekintve rendezetlenül helyezkedtek el az anyagon belüli hőmozgás miatt. Ezután erős, homogén, z -irányú külső mágneses teret kapcsoltak be, amely a hengert telítésig mágnesezte. A homogén mágneses térben valamennyi mágneses momentum beállt a potenciális energia minimumát jelentő, a külső mágneses térrel ellentétes irányba. Megvárták, amíg beállt a henger egyensúlyi állapota. Ekkor átfordították a mágneses indukcióvektor irányát, aminek következtében valamennyi atom mágneses momentuma ellentétes irányúvá vált. Ha a mágneses momentumokhoz impulzusmomentum is tartozik, akkor a kísérletben az eredetileg z -irányú impulzusmomentummal rendelkező pörgettyűk a mágneses indukcióvektor átfordítása után mind a z -tengellyel ellentétes irányba mutatnak. Ez z -irányú impulzusmomentum-változást jelent, amelynek hatására a hengernek el kell fordulnia. A kísérlet elvégzésekor valóban észlelték a henger elfordulását, ill. ennek megfelelően a torziós szál elcsavarodását. Ezzel beigazolódott, hogy az elektron mágneses dipólmomentuma impulzusmomentummal kapcsolatos. Arányosságot feltételezve a mágneses dipólmomentum és az impulzusmomentum között, a torziós szál torziós állandójának ismeretében az elfordulás szögéből meg lehetett határozni a két mennyiség közötti arányossági tényező értékét.

A kísérletben megállapítást nyert

- (a) hogy az elektron mágneses momentumának kapcsolatban kell állnia valamilyen, az elektron által hordozott impulzusmomentummal;
- (b) és hogy ez a kapcsolat lineáris;
- (c) sőt hogy az arányossági tényező különbözik a pályaimpulzusmomentum és a mágneses momentum közötti, a klasszikus elektrodinamikából ismert arányossági tényezőtől, annak kétszerese.

Az elektron így megfigyelt mágneses momentuma tehát nem pályaimpulzusmomentummal kapcsolatos. Azt kell mondjuk, hogy az elektronnak nem pályamozgásból származó, úgynevezett saját impulzusmomentuma, spinje van.

Az Einstein-de Haas-kísérlet és a Stern-Gerlach-kísérlet eredményei alapján azt kell mondani, hogy az elektronnak saját impulzusmomentuma van, amelyhez mágneses momentum is tartozik. Ezek egymással arányosak, de kvantumozott 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.



13. ábra. Az Einstein-de Haas-kísérlet szemléltetése. Ha az erős $\vec{B}$ mágneses indukcióteret ellentétes irányba fordítjuk át, akkor a henger elfordul, és ezért a torziós szárla rögzített tükörre az S fénysugár más szög alatt esik be és megváltozik visszavert S' fénysugár iránya.

A.2. A kvantummechanika néhány további kísérleti bizonyítéka^{*}

1. *Young-féle interferencia-kísérlet részecskékkel.* A fény áthaladása kettős résen olyan klasszikus kísérlet, amelyik a fény hullámtermészetét közvetlenül igazolja. Young¹³⁰ kísérlete perdöntő volt a Newton és Huygens közötti vita eldöntésében, hogy a fény részecske-, vagy hullám-természetű. A kísérlet eredménye mutatta, hogy interferenciaképet kapunk a kettős rés mögötti felfogó ernyőn, ami Huygens álláspontját és a fény hullám-természetét igazolta. Említettük, hogy szellemében hasonló kísérletet végzett Davisson és Germer elektronokból álló anyaghullámmal és sikerült igazolnia az elektronok hullám-természetét. Az anyaghullámok létének még közvetlenebb igazolása, ha elektronokat, vagy más részecskéket bocsátunk át kettős résen és megfigyeljük az áthaladó hullámban az elhajlási képet. Kvantummechanikai ismereteink birtokában mondhatjuk, hogy az anyaghullámok Young-féle kettős résen történő elhajlása azt igazolja, hogy az a két átmeneti amplitúdó, hogy a részecske az F forrásból az 1-es, ill. a 2-es résen keresztül jut el a felfogó ernyő x pontjába, összeadódik:

$$A \sim \langle x|1\rangle\langle 1|F\rangle + \langle x|2\rangle\langle 2|F\rangle. \quad (\text{A.1})$$

Ezért annak a valószínűsége, hogy a részecskét az x pontban detektáljuk,

$$w(x) \sim |A|^2 \sim |\langle x|1\rangle\langle 1|F\rangle|^2 + |\langle x|2\rangle\langle 2|F\rangle|^2 + 2 \operatorname{Re} \langle x|1\rangle^* \langle 1|F\rangle^* \langle x|2\rangle\langle 2|F\rangle.$$

Ha a két rés egyenlő távolságra van a forrástól és a forrás mindkettő irányába azonos módon emittál elektronokat, akkor $|\langle 1|F\rangle|^2 = |\langle 2|F\rangle|^2 = w_F$, úgyhogy

$$w(x) \sim w_F(|\langle x|1\rangle|^2 + |\langle x|2\rangle|^2 + 2 \operatorname{Re} \langle x|1\rangle^* \langle x|2\rangle). \quad (\text{A.2})$$

¹³⁰Thomas Young (1773-1829, angol) polihisztor, aki rendkívül jelentős tevékenységet fejtett ki az optikában. Említést érdemel a látásról szóló munkája. Felfedezte a hullámok interferenciáját (1801) és azt alkalmazta a fényre, pl. fényelhajlási jelenségek magyarázatára. A fény hullámtermészetének első, következetes hirdetője volt Newton korpuszkuláris fényelméletével szemben.

Az átmeneti amplitudó az egyes résektől az ernyő x pontjába a megfelelő réstől az x pontig húzott egyenes szakasz mentén történő szabad mozgás klasszikus $S_{j,x}$ ($j = 1, 2$) hatáskifejezésével adható meg,

$$\begin{aligned}\langle x|j\rangle &\sim e^{\frac{i}{\hbar}S_{j,x}} = e^{\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}mv^2\Delta t_{j,x}} \\ &\sim e^{\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}mv\sqrt{L^2+(x-x_j)^2}} \sim e^{\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}mvL\left(1+\frac{(x-x_j)^2}{2L^2}\right)} \\ &\sim e^{\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}mvL} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{mv(x-x_j)^2}{4L}},\end{aligned}\quad (\text{A.3})$$

ahol L a felfogó ernyő és a kettős rés távolsága, m az elektron tömege, v az ernyőre merőleges sebessége. Felhasználtuk, hogy az ernyő és a kettős rés távolsága $L \gg |x - x_j|$ ($j = 1, 2$). Ekkor a két rés az $x = 0$ -ra szimmetrikusan helyezkedik el, $x_2 = -x_1 = s$, akkor

$$\begin{aligned}w(x) &\sim w_F \left| e^{\frac{i}{\hbar}\frac{mv(x-x_1)^2}{4L}} + e^{\frac{i}{\hbar}\frac{mv(x-x_2)^2}{4L}} \right|^2 \\ &\sim w_F \left\{ 2 + 2 \cos \left[\frac{mv}{4L\hbar} \left((x-x_1)^2 - (x-x_2)^2 \right) \right] \right\} \\ &\sim w_F \left[2 + 2 \cos \left(\frac{mv}{L\hbar} xs \right) \right] \sim 4w_F \cos^2 \left(\frac{mv}{2L\hbar} xs \right).\end{aligned}\quad (\text{A.4})$$

Az ernyő mentén mozgatva a detektort, azaz x -et változtatva, a beütésszámnak fő- és mellékmaximumai vannak.

Újabban lényegében a Young-kísérletet ismételték meg fullerénnel, a C_{60} és a C_{70} fullerénnel (M.Arndt, Nature 401 (1999) 680). Ebben az az érdekesség, hogy a szénnek ezek a kristályos módosulatai rendkívül nagyméretűek, átmenetet képeznek a mikrovilág és a makrovilág objektumai között. Kettősrés helyett nagyon finom beosztású, 100 nm-es rácsállandójú rácsot használtak. A kísérlet egyértelműen igazolta, hogy a fullerének a rácson elhajlási képet hoznak létre.

2. *A hidrogén-atom.* Korábban hidrogén-atom kapcsán részletesen tárgyaltuk, hogy a klasszikus fizika miért nem volt képes megmagyarázni, hogy a hidrogén-atomnak létezik stabil állapota. Arra is rámutattunk, hogy a kvantummechanika törvényei hogyan teszik lehetővé a stabil alapállapot létezését. Az elektron az őt a pozitív töltésű atommag felé vonzó Coulomb-erő és a határozatlansági elv összjátékaként állandó átlagos távolságra marad, és nem is gyorsul alapállapotban, hanem állóhullámszerűen veszi körül az atommagot.

A kvantummechanika egyúttal természetes magyarázatát adja a hidrogén-atom és általában az atomok diszkrét energiájú kötött állapotainak.

3. *A periódusos rendszer felépítése és az elemek kémiai tulajdonságai.* Beszéltünk az elemek Mengyelejev-féle periódusos rendszeréről. Az atomok szerkezetének kvantummechanikai alapokon történő megértése, a molekulák szerkezetének tisztázása, a vegyérték és a kémiai kötés kvantummechanikai magyarázata, mind-mind a kvantummechanika helyességének bizonyítékai.
4. *Rabi-oszcilláció.* Helyezzük az elektron spinjét külső, időben változó $\vec{B}(t)$ indukciójú mágneses térbe. Az elektron Hamilton-operátora ekkor

$$\hat{H}(t) = -g_s \hat{s} \cdot \vec{B}(t), \quad (\text{A.5})$$

ahol $\hat{s} = \frac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}$. Elhagytuk a Hamilton-operátorból az elektronspin „sajátenergiáját” leíró, a továbbiak szempontjából érdektelen tagot. Alkalmazzunk olyan külső mágneses teret,

amikor a mágneses indukció vektora a z -tengellyel adott szöget bezárva „precesszál” a z -tengely körül:

$$\vec{B}(t) = (B_1 \cos \omega t, B_1 \sin \omega t, B_0). \quad (\text{A.6})$$

Rabitol¹³¹ (Phys. Rev. **51** (1937) 652) származik az alábbi ötlet: Válasszuk meg a mágneses indukció vektorának precessziós ω szögsebességét úgy, hogy az éppen megegyezzen az elektronspin Larmor-precessziója szögsebességével, ami a mágneses tér z -irányú, sztatikus komponense miatt lép fel. Ekkor az alkalmazott $\vec{B}(t)$ mágneses tér az elektron spinjét periódikusan, rezonanciaszerűen forgatja a z -tengelyre merőlegesen, a z -tengelyhez képest „felfelé” és „lefelé” mutató spinállások között. Ez a **Rabi-oszcilláció**. A felismert jelenség szép igazolása egyrészt a kvantummechanikának, másrészt gyakorlati szempontból is nagyon jelentős. A Rabi-oszcilláció további fontos kísérleti módszerek alapjául szolgál:

- (a) **A magmágneses rezonancia módszere** (idegen szóval: **Nuclear Magnetic Resonance**, röviden **NMR**), amikor a külső mágneses tér az atommag spinjének Rabi-oszcillációját idézi elő. Ezen a jelenségen alapul az **NMR-spektroszkópia**¹³², ami ma már általánosan elterjedt **anyagvizsgálati módszer**.
- (b) **Az orvosdiagnosztikában** általánosan elterjedten használják a **mágneses rezonanciás képalkotás**¹³³ módszerét az agy és más szervek képének előállítására (ld. <http://physicsweb.org/article/news/7/10/3/1>). A módszer szintén a magmágneses rezonancián, azaz az atommagok mágneses momentumainak Rabi-oszcillációján alapul. A mintáról azáltal sikerül két-dimenziós képeket alkotni, hogy inhomogén, azaz térbeli gradienssel rendelkező mágneses teret alkalmaznak. A képhez tartozó információ gyors begyűjtésére külön módszert fejlesztettek ki.
- (c) Az eddig megvalósított **kvantumszámítógép vezérlése** is a Rabi-oszcilláción alapult (ld. pl. Papp Gy., Természettudományi Közlöny, 2003, 134. évf., 3. füzet, 103-106.; I.L. Chuang, N. Gershenfeld, M. Kubinec, Phys.Rev.Lett. **80** (1998) 3408).

Az elektron $|\chi(t)\rangle$ időtől függő spinállapota a

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\chi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\chi(t)\rangle \quad (\text{A.7})$$

Schrödinger-egyenlet megoldása. Legyen a kezdeti feltétel a $t = 0$ időpillanatban a $|\chi(0)\rangle$ állapot. Akkor az időtől függő Schrödinger-egyenlet megoldása (A. Galindo, P. Pascual, *Quantum Mechanics II.*, (Springer, 1990)):

$$\begin{aligned} |\chi(t)\rangle &= \hat{U}(t) |\chi(0)\rangle, \\ \hat{U}(t) &= e^{-i\frac{1}{2}\omega t \hat{\sigma}_z} e^{-i\frac{1}{2}[(\omega_0 - \omega)\hat{\sigma}_z + \omega_1 \hat{\sigma}_x]t} \\ &= \left(\cos \frac{1}{2}\omega t - i\hat{\sigma}_z \sin \frac{1}{2}\omega t \right) \left(\cos \frac{1}{2}\Omega t - i\hat{\sigma}' \sin \frac{1}{2}\Omega t \right), \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

¹³¹Isidor Isaac Rabi (1898-1988, amerikai) 1944-ben kapott fizikai Nobel-díjat azért a rezonancia módszerért, amelyet az atommagok mágneses tulajdonságainak meghatározására fejlesztett ki.

¹³²Az 1952. évi fizikai Nobel-díjat megosztva ítélték oda Felix Blochnak (1905-1983, svájci-amerikai) és Edward Mills Purcellnek (1912-1997, amerikai) részben azoknak az új módszereknek a kifejlesztéséért, amelyek precíziós magmágneses méréseket tesznek lehetővé, részben azokért a felfedezéseikért, amelyeket ezekkel a módszerekkel tettek.

¹³³A 2003. évi fiziológiai vagy orvosi Nobel-díjat megosztva Paul Christian Lauterbur (1929-2007, amerikai) és Peter Mansfield (1933-, angol) kapták a mágneses rezonanciás képalkotás terén tett felfedezéseikért.

ahol

$$\begin{aligned}\omega_0 &= -g_s B_0, & \omega_1 &= -g_s B_1, \\ \Omega &= \left[(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \\ \hat{\sigma}' &= \frac{1}{\Omega} [(\omega_0 - \omega) \hat{\sigma}_z + \omega_1 \hat{\sigma}_x].\end{aligned}\tag{A.9}$$

Itt Ω az úgynevezett Rabi-frekvencia, ω_0 pedig annak a Larmor-precesszióknak lenne a szögsebessége, ami akkor következne be, ha a mágneses térnek az oszcilláló komponensei eltűnnének (ld. a 4.1.2. fejezetet).

Válasszuk a „felfelé” mutató $|+\rangle$ spinállapotot, mint kezdeti állapotot. Ekkor annak a valószínűsége, hogy t idő múlva a spin a „lefelé” mutató $|-\rangle$ állapotban van,

$$w_{\downarrow \leftarrow \uparrow} = \left| \langle - | \hat{U}(t) | + \rangle \right|^2.\tag{A.10}$$

Ez a valószínűség 1 akkor és csak akkor, ha teljesülnek a **Rabi-oszcilláció feltételei**:

- (a) a **rezonanciafeltétel**: $\omega = \omega_0$, azaz $\Omega = |\omega_1|$, és
- (b) az időpillanat kielégíti az

$$\Omega t = 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots\tag{A.11}$$

feltételt.

A spin ekkor úgynevezett Rabi-oszcillációt végez a $|+\rangle$ és a $|-\rangle$ állapotok között: Ω körfrekvenciával ide-oda billen. A rezonancia-feltételt kielégítő mágneses indukcióteret Rabi-féle térnek nevezzük. A Rabi-féle tér további előnye, hogy megfelelő ideig történő alkalmazásával a spint kívánt módon forgathatjuk a térben.

5. **Összefonódott állapotok.** Az **állapotok összefonódása** olyan kvantummechanikai jelenség, amikor két, megkülönböztethető állapotokkal rendelkező részecske állapota között sokkal szorosabb kapcsolat van, mint az a klasszikus fizika szerint lehetséges lenne. Nevezetesen, ha két – egymástól akár tetszőlegesen távol tartózkodó – részecske összefonódott állapotban van, és az egyik állapotát mérésel meghatározzuk, akkor a másik részecske állapota is ismert lesz. Pl. az összefonódott állapot lehet olyan, hogy ha az egyik részecske spinje felfelé mutat, akkor a másiké bizonyosan lefelé mutat. Az összefonódott állapotok a kvantuminformatika és a kvantumszámítógépek szempontjából kulcsfontosságúak. Az összefonódott, nem szeparálható állapotok természetéről már beszéltünk a 5.1 fejezetben. Láttuk, hogy lényegében arról van szó, hogy megkülönböztethető állapotok lineáris szuperpozícióját kell előállítani. A már említett példánál maradva, amikor két részecskénk van fel- vagy lefelé mutató spinekkel, azaz $|\uparrow\rangle$ vagy $|\downarrow\rangle$ állapotban, akkor négy lehetséges bázisállapot van a két-részecskés rendszer spinállapotainak a Hilbert-terében:

$$|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \quad |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle, \quad |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \quad |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle,\tag{A.12}$$

ahol az első, ill. a második tényező rendre az egyik, ill. a másik részecske állapotterében van, és

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_z |\uparrow\rangle &= +|\uparrow\rangle, \quad \hat{\sigma}_z |\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle, \\ \hat{\sigma}^2 |\uparrow\rangle &= |\uparrow\rangle, \quad \hat{\sigma}^2 |\downarrow\rangle = |\downarrow\rangle.\end{aligned}\tag{A.13}$$

Könnyű megmutatni közvetlen számolással, hogy az eredő spin $\hat{\Sigma} = a(\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2)$, pontosabban $\hat{\Sigma}^2$ és $\hat{\Sigma}_z$ közös $|S, M\rangle$ sajátállapotai¹³⁴:

S	M	sajátállapot
$2a$	$-2a$	$ \downarrow\rangle \otimes \downarrow\rangle$
$2a$	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\rangle \otimes \downarrow\rangle + \downarrow\rangle \otimes \uparrow\rangle)$
$2a$	$2a$	$ \uparrow\rangle \otimes \uparrow\rangle$
0	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\rangle \otimes \downarrow\rangle - \downarrow\rangle \otimes \uparrow\rangle)$

A fenti példánkban az $M = 0$ eredő spinvetületű állapotok összefonódott állapotok, amelyek a kvantummechanikai lineáris szuperpozíció elvének köszönhetik létüket. Tényleges fizikai megvalósításuk a kvantummechanika egyik szép kísérleti bizonyítéka. Az egyes részecskék spinállapotainak összefonódásáról kísérletileg is meggyőződhetünk. Ha megmérjük az egyik részecske spinvetületét, akkor a mérés $\frac{1}{2}$, ill. $-\frac{1}{2}$ valószínűséggel eredményez fel-, ill. lefelé mutató spinállást. A mérés után azonban a másik részecske rendre bizonyosan lefelé, ill. felfelé mutató spinállásban lesz megtalálható. Ez a korreláció akkor is fennáll, ha a két részecske térben tetszőlegesen távol van egymástól.

Az utóbbi néhány évben az összefonódott állapotok kísérleti megvalósítása terén jelentős előrelépés történt. Kutatás folyik egyrészt azon a területen, hogy milyen messzire lehet egymástól eltávolítani két, összefonódott spinállapotú részecskét, anélkül, hogy a környezet „szétrombolná” ezt az állapotot. Ez azért érdekes, mert a kvantummechanikai állapot lemásolásához (kvantumteleportáció) és kvantuminformatikai módszerrel titkosított üzenetek továbbításához van rá nagy szükség. Másik fontos kutatási terület a több-részecskés összefonódott állapotok előállítása, amire a tervbe vett kvantumszámítógépek megvalósításához lenne szükség. Különösen fontos lenne kubiteknek szilárdtestekben történő realizációja és ilyen kubitek összefonódott állapotainak létrehozása, ill. ilyen kubitek vezérlése.

6. *Bose-kondenzátumok interferenciája.* Ugyancsak a kvantummechanika kísérleti bizonyítékai közé sorolhatjuk a Bose-kondenzátumok interferenciájának megfigyelését, amiről korábban már részletesen beszéltünk.
7. *Az elektronmikroszkóp és az úgynevezett pásztázó alagútmikroszkóp.* Az elektronmikroszkóp¹³⁵ és az úgynevezett pásztázó alagútmikroszkóp¹³⁶ működése a kvantummechanika alapjaival kapcsolatos. Az **elektronmikroszkóp** működése azon alapul, hogy az elektronok anyag-hullámként viselkednek. Az elektronnyalábot ugyanúgy lehet alkalmas elektromágneses terekkel kezelni, mint az optikában a fényt lencsékkel és tükrökkel, és ezt fel lehet használni arra, hogy elektronokkal meg-, ill. átvilágított tárgyról képet alkossunk. Az **elektronoptika** foglalkozik azon elektromágneses berendezések tervezésével, amelyek lencseként, tükröként hatnak az elektronokra. A **pásztázó alagútmikroszkóp** más elven működik: az alagúteffektust használja, és – mint arról már volt szó a 4.2.12 fejezetben – ennek az effektusnak nincsen klasszikus fizikai megfelelője. Mind az elektronmikroszkópnak, mind a pásztázó alagútmikroskópnak a léte, működése szorosan összefügg a kvantummechanika alapjaival. Működésük annak fényes bizonyítéka, hogy a kvantummechanika helyes fizikai elmélet.

¹³⁴Elektronok esetén $a = \frac{1}{2}$, fotonok esetén $a = 1$. A fotont azért tekinthetjük a spin tekintetében két-állapotú rendszernek, mert $1\hbar$ spinje csak az impulzussal egyező vagy azzal ellentétes irányba mutathat, mert a foton nyugalmi tömege zérus.

¹³⁵Ernst Ruska (1906-1988) 1986/ban megosztott fizikai Nobel-díjban részesült az elektronoptikában folytatott alapozó munkásságáért és az első elektronmikroszkóp megtervezéséért.

¹³⁶Az 1986. évi fizikai Nobel-díj másik két díjazottja egynegyed-egynegyed arányban Gerd Binnig (1947-) és Heinrich Rohrer (1933-), akik a pásztázó alagútmikroszkóp megtervezéséért kapták a megtisztelő elismerést.

Az elektronmikroszkóp kifejlesztése Ruska korai munkájával kezdődött, amelyet, mint a Berlin-i Műszaki Egyetem fiatal hallgatója végzett az 1920-as évek végén. Rájött, hogy egy mágneses tekercs lencseként hathat az elektronokra, és egy ilyen elektronlencsét fel lehet használni arra, hogy képet alkossunk az elektronokkal besugárzott tárgyról. Két elektronlencse segítségével megépítette az első, nagyon egyszerű elektronmikroszkópot. A részletek további tökéletesítése után végül 1933-ra építette meg az első olyan elektronmikroszkópot, amely tulajdonságaiban felülmúlta az optikai mikroszkópokat. Az elektronmikroszkópos vizsgálati módszerek a folyamatos fejlesztések révén ma már a tudomány számos területére behatoltak, mint pl. az anyagtudományba, a biológiába és az orvostudományba. Az elektronmikroszkóp fő előnye, hogy a látható fény hullámhosszánál kisebb méretű szerkezetek vizsgálhatók a segítségével. Azonban még ez sem elég ahhoz, hogy az anyag atomos szerkezetét az elektronmikroszkópos képen láthatóvá tegyünk. Erre a pásztázó alagútmikroszkóp nyitotta meg az utat.

A pásztázó alagútmikroszkóp nem hagyományos értelemben vett mikroszkóp, amely képet alkot. Egy tűt mozgatunk a vizsgált tárgy felülete fölött, attól adott távolságban, ezzel a tűvel pásztázzuk a tárgy felületét. A tű felülettől mért távolságát az alagúteffektus révén szabályozzuk. A tű hegye és a felület közti elektromos potenciálkülönbség következtében a felület és a tű között az alagúteffektus révén áram folyik, annak dacára, hogy nem érintkeznek. Az áramerősség olyan erősen függ a távolságtól, hogy azt kb. 10^{-7} cm-es állandó értéken lehet tartani, ami kb. kétszeres atomi átmérőnek felel meg. A tű nagyon hegyes, egyetlen atom alkotja a hegyét. Ezáltal a pásztázott felület legkisebb egyenetlenségét is nyomon lehet követni. Feljegyezve a pásztázás során a tű helyzetének változásait, a felület szerkezetét atomról atomra haladva tanulmányozhatjuk. Binnig és Rohrer érdeme, hogy nemcsak az ötletük eredeti, hanem technikai megoldást is tudtak adni azokra a problémákra, amelyekkel ennek a precíziós műszernek a megépítése során szembe kellett nézniük.

8. *A kvantált Hall-effektus.* A **kvantált Hall-effektus** szintén olyan jelenség, ami a kvantummechanika működésének bizonyítéka. A klasszikus elektrodinamika szerint is fellép Hall-effektus, ebben azonban nincsen semmi „kvantumos”. Ha vezetőn áram folyik át és az áramra merőleges irányban mágneses teret alkalmazunk, akkor a vezetőnek az áram és a mágneses tér irányára egyaránt merőleges felületei között potenciálkülönbség jön létre, amelynek oka hogy a Lorentz¹³⁷-erő hatására a v driftsebességgel áramló elektronok eltérülnek. Az eredeti áramirányra és a mágneses indukció térre egyaránt merőleges oldallapok közti feszültség, a Hall¹³⁸-feszültség $\mathcal{E}_H = vB\ell$, ahol B a mágneses indukció nagysága, és ℓ a szóbanforgó oldallapok távolsága. Az $i = fv$ áramerősség (f az eredeti áramirányra merőleges vezetőkeresztmetszet) és az $\mathcal{E}_H$ Hall-feszültség hányadosa, pontosabban a Hall vezetőképesség, $\sigma_H = i\ell/\mathcal{E}_H = i/(vB) = f/B$ a mágneses indukciónak szigorúan monoton csökkenő függvénye. Az effektus közönséges fémekben és félvezetőkben lép fel és a fenti, klasszikus elektrodinamikán alapuló magyarázat kielégítő a tapasztalat szerint.

Egészen új jelenség mutatkozik azonban, ha a Hall-effektust **kétdimenziós elektronrendszerekben** vizsgáljuk. Ezek olyan anyagok, amelyekben az elektronok egy nagyon vékony rétegben, lényegében egy felületen tudnak csak mozogni, pl. egy vezető és egy félvezető közötti határfelületen. Ilyen két-dimenziós rendszerek nem fordulnak elő a Természetben,

¹³⁷Hendrik Antoon Lorentz (1853-1928) és Pieter Zeeman (1865-1943) 1902-ben fizikai Nobel-díjban részesültek azon rendkívüli szolgálataik elismeréseként, amelyeket a mágnességnek a sugárzási jelenségekre gyakorolt hatásának kutatásával végeztek. Lorentz munkásságából kiemelkedik az anyag róla elnevezett elektronelmélete, a Zeeman-effektus elméleti magyarázata, valamint a relativitáselméletet mintegy előkészítő Lorentz-Fitzgerald-féle kontrakció gondolata és a Lorentz-transzformáció felfedezése.

¹³⁸Edwin Herbert Hall (1855-1938) fizikus 1879-ben fedezte fel a később róla elnevezett jelenséget.

de mesterségesen előállíthatók a félvezető elektronikában használatos módszerekkel. A **kvantált Hall-effektus** lényege, hogy ilyen két-dimenziós elektronrendszerekben a Hall-vezetőképesség a mágneses indukció függvényében nem folytonosan, hanem lépcsős függvényként változik, csak diszkrét értékeket vehet fel, azaz kvantált. von Klitzing¹³⁹ méréseivel (1980 körül) bebizonyította, hogy a Hall-vezetőképesség e^2/h egész számú többszöröse, ahol e az elektron töltésének nagysága, h a Planck-állandó. Azt találta, hogy a Hall-vezetőképesség és az e^2/h „kvantum” hányadosa valamelyik 1, 2, ... egész számtól nem tér el jobban, mint 10^{-7} . A „kvantálási szabály” ilyen rendkívüli pontosságú teljesedése teszi lehetővé, hogy az elemi Hall-ellenállást hitelesítő standardként lehessen használni az ellenállásmérésben. Egyúttal lehetővé teszi az e^2/h állandó nagyon nagy pontosságú meghatározását is, aminek az atom- és részecskefizika szempontjából van nagy jelentősége.

További nagy érdeklődést kiváltó fejlemény volt az 1980-as évek elején a **tört Hall-effektus** felfedezése a Bell Laboratóriumban, amikor azt találták, hogy a Hall-vezetőképesség bizonyos esetekben e^2/h nem egész számszorosa is lehet: $1/3$, $2/3$, $4/3$, $5/3$, $2/5$, $3/5$, $4/5$, $2/7$, stb.

A kvantált Hall-effektusnak lényegében az az oka, hogy nagyon alacsony hőmérsékleten az elektronok közötti ütközések elhanyagolhatók, és hogy az egymással kölcsön nem ható elektronok ekkor a két-dimenziós vezetőre merőlegesen alkalmazott erős homogén mágneses térben diszkrét energiaállapotokkal rendelkeznek. Az erre vonatkozó elméleti megfontolás Landautól¹⁴⁰ (1930) származik. Az elektronoknak a homogén mágneses térben felvett diszkrét energiáit **Landau-nívóknak** nevezik. A **tört Hall-effektus** egy sokkal bonyolultabb jelenség, amelyben az elektronok közötti kölcsönhatás kellő erőssége is fontos szerepet játszik.

B. Várható érték, szórásnégyzet

Ha dobókockával dobunk, akkor a dobásnak hatféle lehetséges kimenetele lehet: a felfelé elhelyezkedő lapon kaphatunk 1-est, 2-est, ... és 6-ost. Ha „tisztességesen” játszunk, akkor N -szer egymás után függetlenül elvégzett dobási kísérletben mindegyik eredmény nagyjából azonos számú alkalommal következik be. Ha a 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,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_k}{N} = w_k, \quad (\text{B.14})$$

¹³⁹Klaus von Klitzing (1943-) 1985-ben fizikai Nobel-díjban részesült a kvantált Hall-effektus felfedezéséért.

¹⁴⁰Lev Davidovics Landau (1908-1968) fizikai Nobel-díjban részesült a szilárdtestekre, különös tekintettel pedig a folyékony héliumra vonatkozó úttörő elméleti munkásságáért.

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

$$\sum_k w_k = 1. \quad (\text{B.15})$$

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 $N^{[1]}, N^{[2]} > N^{[1]}, \dots, N^{[M]} > N^{[M-1]}$ 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 az M darab kísérletsorozatban mindig ugyannannyi, $N \gg 1$ a kísérletek száma, és felveszi a fizikus azt a hisztogrammot, ami az egyes relatív gyakoriságoknak a kísérletsorozatokban történő bekövetkezési gyakoriságát ábrázolja. Ha azt találja, 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 véletlen 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:

$$\bar{x} = \sum_k w_k x_k. \quad (\text{B.16})$$

A várható érték tehát köznyelven szólva a véletlen változó átlagos értéke.

Az egyedi véletlen kísérletek eredményei azonban jobban vagy kevésbé különbözhetnek a várható értéktől. Az átlagos eltérés jellemzésére vezetjük be a **szórás-négyzet** fogalmát, ami nem más, mint a véletlen változó értékének a várható értéktől való négyzetes eltérésének a várható értéke:

$$\Delta^2 x = \overline{(x - \bar{x})^2} = \sum_k w_k (x_k - \bar{x})^2. \quad (\text{B.17})$$

A definícióból rögtön következik, hogy a szórásnégyzet nem más, mint a véletlen változó négyzete várható értékének és a várható értéke négyzetének a különbsége:

$$\Delta^2 x = \overline{x^2} - (\bar{x})^2. \quad (\text{B.18})$$

A bizonyítás igen egyszerű:

$$\begin{aligned} \Delta^2 x &= \sum_k w_k (x_k - \bar{x})^2 = \sum_k w_k [x_k^2 - 2x_k \bar{x} + (\bar{x})^2] = \overline{x^2} - 2\bar{x} \sum_k w_k x_k + (\bar{x})^2 \sum_k w_k \\ &= \overline{x^2} - 2(\bar{x})^2 + (\bar{x})^2 = \overline{x^2} - (\bar{x})^2. \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Általában az x véletlen változó tetszőleges $f(x)$ függvénye is véletlenszerűen veszi fel az értékét, s ennek várható értéke

$$\overline{f(x)} = \sum_k w_x f(x_k), \quad (\text{B.20})$$

ill. szórásnégyzete

$$\Delta^2 f = \sum_k w_x [f(x_k) - \overline{f(x)}]^2. \quad (\text{B.21})$$

Tekintsük most a folytonos x valószínűségi változó esetét. Ezt avval tudjuk kimerítően jellemezni, hogy megmondjuk, mi annak a $P(x \leq x')$ valószínűsége, hogy olyan x értéket vesz fel, amely nem nagyobb, mint egy előre tetszőlegesen megadott x' valós szám. Úgy értelmezzük az x valószínűségi változó $F(x') = P(x \leq x')$ eloszlásfüggvényét, hogy megadjuk a $P(x \leq x')$ valószínűséget, mint az x' függvényét. Vegyük észre, hogy ez a definíció mindig értelmes, akkor is, ha az x változó a számegyenesnek csak egy véges intervallumában vesz fel értékeket. A folytonos véletlen változót avval is jellemezhetjük kimerítően, ha megadjuk, hogy tetszőleges infinitezimális $(x, x + dx)$ intervallumban milyen valószínűséggel veszi fel az értékeit,

$$dw(x) = F(x + dx) - F(x). \quad (\text{B.22})$$

Ha az $F(x)$ eloszlásfüggvény differenciálható, (vagy legalább szakaszonként differenciálható), akkor (legalább szakaszonként) értelmezhetjük az úgynevezett $\rho(x)$ **valószínűségi sűrűségfüggvényt** a

$$dw(x) = \rho(x)dx \quad (\text{B.23})$$

módon, úgyhogy **a valószínűségi sűrűségfüggvény az eloszlásfüggvény első deriváltja:**

$$\rho(x) = \frac{dF(x)}{dx}. \quad (\text{B.24})$$

Az eloszlásfüggvény definíciójából következik, hogy az $F(x)$ függvény alulról és felülről korlátos,

$$0 \leq F(x) \leq 1, \quad (\text{B.25})$$

monoton növekvő és

$$F(-\infty) = 0, \quad F(+\infty) = 1, \quad (\text{B.26})$$

A valószínűségi sűrűség definíciójából következik, hogy nem negatív, $\rho(x) \geq 0$, integrálható és

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)dx = 1. \quad (\text{B.27})$$

Ha a folytonos véletlen változó csak az $[a, b]$ véges intervallumon vesz fel értékeket, az eloszlásfüggvény és a sűrűségfüggvény 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 eloszlásfüggvény jobb-, ill. baloldali deriváltjával azonosíthatjuk. Az eloszlásfüggvényt visszaállíthatjuk a valószínűségi sűrűségfüggvényből,

$$F(x) = \int_{-\infty}^x \rho(x')dx'. \quad (\text{B.28})$$

Az eloszlás-, és a sűrűségfüggvény megadása kimerítően jellemzi a folytonos valószínűségi változót. Sokszor elegendő azonban a várható értékkel és a szórásnégyzettel történő (általában részleges) jellemzés. A várható érték definíciója:

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} xdw(x) = \int_{-\infty}^{\infty} x\rho(x)dx. \quad (\text{B.29})$$

A szórásnégyzet definíciója:

$$\Delta^2 x = \overline{(x - \bar{x})^2} = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \bar{x})^2 \rho(x)dx. \quad (\text{B.30})$$

Most is érvényes az alábbi azonosság:

$$\Delta^2 x = \overline{x^2} - (\bar{x})^2 = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \rho(x)dx - \left(\int_{-\infty}^{\infty} x\rho(x)dx \right)^2. \quad (\text{B.31})$$

A folytonos x véletlen változó tetszőleges („kellően jó viselkedésű”) $f(x)$ függvényének a várható értéke

$$\bar{f} = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\rho(x)dx, \quad (\text{B.32})$$

ill. szórásnégyzete

$$\Delta^2 f = \int_{-\infty}^{\infty} [f(x) - \bar{f}]^2 \rho(x)dx. \quad (\text{B.33})$$

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 (párunként 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 sűrűségfüggvénye:

$$\rho(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha, } x \notin [a, b] \\ \frac{1}{L}, & \text{ha, } x \in [a, b] \end{cases} \quad (\text{B.34})$$

azaz az $[a, b]$ intervallumban állandó, az $[a, b]$ intervallumon kívül pedig zérus értéket vesz fel. Az eloszlásfüggvény:

$$F(x) = \int_{-\infty}^x dx' \rho(x') = \begin{cases} 0, & \text{ha, } x < a \\ \frac{x-a}{L}, & \text{ha, } x \in [a, b] \\ 1, & \text{ha, } x > b \end{cases} \quad (\text{B.35})$$

Az x folytonos valószínűségi változót normális –, vagy Gauss-eloszlásúnak nevezzük, ha a sűrűségfüggvénye egyre normált Gauss-függvény,

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}. \quad (\text{B.36})$$

Ennek az eloszlásnak két darab valós, folytonos paramétere van, $\sigma > 0$ és $x_0 \in (-\infty, +\infty)$. Az eloszlásfüggvény az úgynevezett **hibafüggvény**,

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{(x'-x_0)^2}{2\sigma^2}} dx' \quad (\text{B.37})$$

nem írható fel zárt alakban. Teljesül a sűrűségfüggvényektől elvárt

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} dx = 1 \quad (\text{B.38})$$

feltétel (ld. a C. Függelék). A normális eloszlás két paraméterének közvetlen jelentése van. A normális eloszlású valószínűségi változó várható értéke

$$\bar{x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} dx = x_0, \quad (\text{B.39})$$

a szórásnégyzete pedig

$$\Delta^2 x = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} (x - x_0)^2 e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} dx = \sigma^2. \quad (\text{B.40})$$

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

$$I(a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad (\text{C.41})$$

ahol $a > 0$ valós paraméter. Vegyük észre, hogy az integrandus pozitív, aminek következtében $I(a) > 0$. Képezzük az integrál négyzetét és a két integrál szorzatát értelmezzük úgy, mint az (x, y) 2-dimenziós S síkra történő integrálást,

$$I^2(a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-ay^2} = \int_S dx dy e^{-a(x^2+y^2)} \quad (\text{C.42})$$

Hajtsunk végre integráltranszformációt, térjünk át az (x, y) Descartes-koordinátákról az (r, φ) síkbeli polárkoordinátákra,

$$x = r \cos \varphi, \quad y = r \sin \varphi. \quad (\text{C.43})$$

A változótranszformáció Jacobi-mátrixának determinánsa

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \varphi} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \cos \varphi & -r \sin \varphi \\ \sin \varphi & r \cos \varphi \end{vmatrix} = r, \quad (\text{C.44})$$

úgyhogy az új változókban az S síkra vett integrál

$$I^2(a) = \int_S |J| e^{-ar^2} dr d\varphi = \int_0^{\infty} dr \int_0^{2\pi} d\varphi r e^{-ar^2} = 2\pi \int_0^{\infty} dr r e^{-ar^2}. \quad (\text{C.45})$$

Vegyük észre, hogy a jobb oldalon álló integrál integrandusa lényegében az e^{-ar^2} függvény r szerinti deriváltja,

$$I^2(a) = \frac{2\pi}{-2a} \int_0^{\infty} dr \frac{\partial e^{-ar^2}}{\partial r} = \frac{2\pi}{-2a} (-1) = \frac{\pi}{a}. \quad (\text{C.46})$$

Figyelembe véve, hogy $I(a) > 0$, innen már adódik, hogy $I(a) = \sqrt{\pi/a}$.

2. Ha az integrandus páratlan kitevős monom és a Gauss-függvény szorzata, akkor

$$I_{2n+1}(a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^{2n+1} e^{-ax^2} = 0, \quad n \geq 0, \quad a > 0, \quad (\text{C.47})$$

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx [-f(-x)], \quad (\text{C.48})$$

ahol áttérve az $y = -x$ integrálási változóra a Jacobi-determináns $J = \frac{\partial x}{\partial y} = -1$ és az integrál

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx [-f(-x)] = \int_{-\infty}^{\infty} |J| dy [-f(y)] = - \int_{-\infty}^{\infty} dy f(y). \quad (\text{C.49})$$

Itt viszont a jobb oldalon a baloldali integrál mínusz egyszerese áll, ezért az integrál zérus.

3. Páros kitevőjű monom és Gauss-függvény szorzatának integrálja,

$$I_{2n}(a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^{2n} e^{-ax^2} = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial a^n} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = (-1)^n \frac{\partial^n I(a)}{\partial a^n}, \quad n \geq 1. \quad (\text{C.50})$$

Behelyettesítve az $I(a) = \sqrt{\pi/a}$ eredményt, és elvégezve az egymás utáni deriválásokat, kapjuk, hogy

$$I_{2n}(a) = \pi^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} \cdots \frac{2n-1}{2} a^{-\frac{2n+1}{2}} = \frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{2^n a^{-n-\frac{1}{2}}}. \quad (\text{C.51})$$

- 4.

$$I(a, b) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2+bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}}, \quad a > 0, \quad (\text{C.52})$$

és b tetszőleges valós paraméter. A bizonyításhoz alakítsuk a kitevőt teljes négyzetté,

$$-ax^2 + bx = -a \left(x - \frac{b}{2a} \right)^2 + \frac{b^2}{4a}, \quad (\text{C.53})$$

majd térjünk át a $z = x - \frac{b}{2a}$ „eltolt” integrálási változóra,

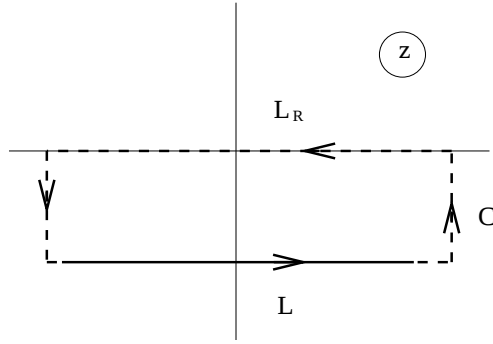
$$I(a, b) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2+bx} = e^{\frac{b^2}{4a}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-az^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}}. \quad (\text{C.54})$$

5. Ha az integrandus kitevőjében $a > 0$ és a lineáris tag együtthatója ib tiszta képzetes (b valós), akkor

$$I(a, b) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2+ibx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\frac{b^2}{4a}}, \quad (\text{C.55})$$

ahol az eredmény nem más, mint amit 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),

$$I(a, b) = e^{\frac{(ib)^2}{4a}} \int_{L \rightarrow} dz e^{-az^2} = e^{-\frac{b^2}{4a}} \int_{L \rightarrow} dz e^{-az^2}. \quad (\text{C.56})$$



14. ábra. Az integrálás útja a z komplex síkon a C zárt görbe mentén.

Az integrandus analitikus függvénye a z komplex változónak a valós tengely és az L egyenes közti tartományban, ezért

$$\oint_C dz e^{-az^2} = \int_{L \rightarrow} dz e^{-az^2} + \int_{L_R^{\leftarrow}} dz e^{-az^2} = 0 \quad (\text{C.57})$$

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. 14. ábra). (A nyílak a felső indexben a haladási irányt jelölik.) A képzetes tengellyel párhuzamos szakaszok járuléka az integrálhoz zérus, mert $\text{Re } z \rightarrow \pm\infty$ esetén az integrandus minden hatványfüggvényénél gyorsabban tart zérushoz. Ezért

$$\int_{L \rightarrow} dz e^{-az^2} = - \int_{L_R^{\leftarrow}} dz e^{-az^2} = \int_{L_R^{\rightarrow}} dz e^{-az^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad (\text{C.58})$$

és az integrál értéke

$$I(a, b) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\frac{b^2}{4a}}. \quad (\text{C.59})$$

D. Dirac-delta

A $\delta(x - a)$ Dirac-delta olyan „függvény”, amelynek értéke mindenütt zérus, kivéve az $x = a$ pontot, ahol végtelen. Ez a furcsa tulajdonságú matematikai objektum és a deriváltjai úgy vannak értelmezve, mint

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx K(x) f(x) \quad (\text{D.1})$$

alakú integrálok $K(x)$ magjai, ahol $f(x)$ tetszőleges, „jó tulajdonságú” függvény¹⁴¹. 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 a (D.1) alakú integrálok magjában, mint a $\delta(x-a)$ Dirac-delta, ezért azonosítható vele.

A Dirac-delta néhány fontos tulajdonsága ugyancsak a (D.1) alakú integrálba való behelyettesítéssel igazolható:

$$\delta(-x) = \delta(x), \quad (\text{D.5})$$

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|} \delta(x), \quad (\text{D.6})$$

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{\left| \frac{df(x)}{dx} \right|_{x=x_i}}, \quad (\text{D.7})$$

$$x\delta(x) = 0, \quad (\text{D.8})$$

$$f(x)\delta(x-x_0) = f(x_0)\delta(x-x_0), \quad (\text{D.9})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(a-x)\delta(x-b) = \delta(a-b), \quad (\text{D.10})$$

$$\delta(x^2-a^2) = \frac{\delta(x-a) + \delta(x+a)}{2|a|}, \quad (\text{D.11})$$

$$x \frac{d}{dx} \delta(x) = -\delta(x), \quad (\text{D.12})$$

$$(\text{D.13})$$

¹⁴¹Az $f(x)$ függvényről feltesszük, hogy végtelen sokszor differenciálható és, hogy bármely deriváltja gyorsabban tart nullához, mint $|x|$ bármely negatív, egész kitevős hatványa, ha $|x| \rightarrow \infty$. Ezek a függvénye a négyzetesen integrálható függvények $L_2(\mathbb{R}, dx)$ terének mindenütt sűrű alterét képezik, amelyet Schwartz-térnek neveznek.

ahol α , a és b tetszőleges, nem nulla valós számok, $f(x)$ tetszőleges, differenciálható függvény, amelynek zérushelyei az $x = x_i$ helyeken vannak, $f(x_i) = 0$.

A Dirac-deltának ismeretes néhány határérték-előállítása:

$$\begin{aligned}\delta(x) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\sin(xL)}{\pi x}, \\ \delta(x) &= \frac{1}{\pi} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1 - \cos(Tx)}{Tx^2}, \\ \delta(x) &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\alpha}{\alpha^2 + x^2}.\end{aligned}\tag{D.14}$$

Ezek az előállítások is mind az (D.1) alakú integrál magjába történő behelyettesítéssel igazolhatók.

A Dirac-delta 3-dimenziós kiterjesztése:

$$\delta(\vec{r} - \vec{a}) = \delta(x - a_x)\delta(y - a_y)\delta(z - a_z),\tag{D.15}$$

ami a

$$\begin{aligned}& \int d^3r \delta(\vec{r} - \vec{a}) f(\vec{r}) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \delta(x - a_x)\delta(y - a_y)\delta(z - a_z) f(x, y, z) \\ &= f(a_x, a_y, a_z) = f(\vec{a})\end{aligned}\tag{D.16}$$

integrállal van értelmezve. A 3-dimenziós Dirac-delta integrál-előállítása:

$$\delta(\vec{r} - \vec{a}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{a})}.\tag{D.17}$$

Gömbi polárkoordinátákban kifejezve:

$$\delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{a}) = \frac{1}{r^2} \delta^{(2)}(\vec{n} - \vec{n}_a) \delta(r - a), \quad \text{ha } a \neq 0,\tag{D.18}$$

ill.¹⁴²

$$\delta^{(3)}(\vec{r}) = \frac{2}{r^2} \delta^{(2)}(\vec{n}) \delta(r), \quad \text{ha } a = 0,\tag{D.19}$$

ahol $\vec{r} = r\vec{n}$, $\vec{a} = a\vec{n}_a$, $|\vec{r}| = r$, $|\vec{a}| = a$. Itt az egységvektorokra vonatkozó 2-dimenziós Dirac-delta

$$\delta^{(2)}(\vec{n} - \vec{n}_a) = \frac{\delta(\theta - \theta_a)\delta(\varphi - \varphi_a)}{\sin \theta}\tag{D.20}$$

¹⁴²Az $a \rightarrow 0$ határátmenet nem képezhető közvetlenül, csak a teljes térre vett $\int d^3r \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{a}) f(\vec{r})$ integrál határértékét lehet képezni, miután elvégeztük a kijelölt integrálást. Ebből adódik az $a \neq 0$ és az $a = 0$ eset közötti 2-es faktor különbség a képletekben, ugyanis $\int_0^\infty dr \delta(r) f(r) = \frac{1}{2} f(0)$, míg $\int_0^\infty dr \delta(r - a) f(r) = f(a)$, ha $a \neq 0$.

alakba is írható.

Egyrészt írhatjuk, hogy tetszőleges $f(\theta, \varphi)$ „jó viselkedésű” függvény esetén

$$\begin{aligned} & f(\theta_a, \varphi_a) \\ &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \delta^{(2)}(\vec{n} - \vec{n}_a) f(\theta, \varphi) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \frac{\delta(\theta - \theta_a) \delta(\varphi - \varphi_a)}{\sin \theta} f(\theta, \varphi), \end{aligned} \quad (\text{D.21})$$

másrészt pedig tetszőleges $f(\vec{r})$ függvény esetén

$$\begin{aligned} \int d^3\vec{r} \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{a}) f(\vec{r}) &= \int_0^\infty r^2 dr \frac{b}{r^2} \delta(r - a) \delta(\vec{n} - \vec{n}_a) f(r, \theta, \varphi) \\ &= b \int_0^\infty dr \delta(r - a) \delta(\vec{n} - \vec{n}_a) f(r, \theta, \varphi) = f(a, \theta_a, \varphi_a), \end{aligned} \quad (\text{D.22})$$

ahol $a = 0$ esetén $b = 2$ és automatikusan megszűnik $f(\vec{a})$ szögfüggése, ill. $a \neq 0$ esetén $b = 1$.

E. Hilbert-tér

E.1. Definiáló tulajdonságok

Röviden foglaljuk össze, melyek az absztrakt $\mathcal{H}$ Hilbert-tér tulajdonságai.

1. A $\mathcal{H}$ Hilbert-tér a $\mathbb{C}$ komplex számtest felett értelmezett lineáris vektortér. (A fizikus számára ez biztosítja a kvantumállapotok lineáris szuperpozíciójának a lehetőségét.) Meg kell jegyezni, hogy a Hilbert-tér lehet véges, vagy megszámlálhatóan végtelen dimenziós vektortér.
2. A $\mathcal{H}$ Hilbert-téren értelmezve van tetszőleges $|\psi\rangle$ és $|\phi\rangle$ állapotvektorok skaláris szorzata (más néven belső szorzata), $(\phi, \psi) \equiv \langle\phi|\psi\rangle$, amely
 - véges, azaz $\forall |\psi\rangle, |\phi\rangle$ esetén $\langle\phi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$ véges komplex szám;
 - a második tényezőjében lineáris,
 - hermitikus, azaz teljesül, hogy $\langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*$,
 - pozitív definit és nem elfajult, vagyis olyan, hogy $\forall |\psi\rangle$ esetén $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$, és az egyenlőség akkor és csak akkor áll fenn, ha $|\psi\rangle = |0\rangle$ a Hilbert-tér nullvektora.

A belső szorzat létezése lehetővé teszi, hogy értelmezzük a $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ állapotvektorok hosszát, más néven normáját,

$$\| |\psi\rangle \| = \sqrt{|\langle\psi|\psi\rangle|} \geq 0, \quad (\text{E.1})$$

ami véges valós szám és csak a 0 nullvektor esetén zérus. Értelmezhetjük továbbá $\forall |\psi\rangle$ és $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ vektorok távolságát, mint a két vektor különbségének

normáját: $\| |\psi\rangle - |\phi\rangle \|$. Ezek végtelen dimenziós Hilbert-tér esetén is hasonló relációknak tesznek eleget, mint a véges dimenziós (komplex számtest fellett értelmezett) euklideszi vektortér esetén:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}\langle\phi|\psi\rangle &\leq \frac{1}{2}\left(\| |\phi\rangle \|^2 + \| |\psi\rangle \|^2\right), \\ |\langle\phi|\psi\rangle| &\leq \| |\phi\rangle \| \| |\psi\rangle \|, \quad " = " \Leftrightarrow |\phi\rangle = c|\psi\rangle, \quad c \in \mathbb{C}, \quad c \neq 0, \\ \|c|\psi\rangle\| &= |c|\| |\psi\rangle \|, \quad \forall c \in \mathbb{C}, \\ \| |\psi\rangle + |\phi\rangle \| &\leq \| |\psi\rangle \| + \| |\phi\rangle \| \quad (\text{háromszög egyenlőtlenség}). \end{aligned} \quad (\text{E.2})$$

A távolság fogalma teszi lehetővé, hogy beszélhessünk olyan fogalmakról, mint a folytonosság, határérték, határpont, sorozatok konvergenciája, stb. Jelöljön általában $F(|\psi\rangle)$ a Hilbert-téren értelmezett függvényt, amely értékét vagy a Hilbert-téren, vagy a komplex számok között veszi fel. Ekkor a szokásos definíciók érvényesek:

- Az $F(|\psi\rangle)$ függvény folytonos a $|\psi_0\rangle$ pontban, ha minden $\varepsilon > 0$ esetén létezik olyan $\delta > 0$, hogy ha $\| |\psi\rangle - |\psi_0\rangle \| < \delta$, akkor $\| F(|\psi\rangle) - F(|\psi_0\rangle) \| < \varepsilon$ vagy $|F(|\psi\rangle) - F(|\psi_0\rangle)| < \varepsilon$ (aszerint, hogy F értékei $\mathcal{H}$ pontjai vagy komplex számok).
- Az $F(|\psi\rangle)$ függvény korlátos $\mathcal{H}$ -n vagy annak valamely részhalmazán, ha létezik olyan rögzített $c \in \mathbb{R}$ szám, hogy $\| F(|\psi\rangle) \| < c$ vagy $|F(|\psi\rangle)| < c$.
- A $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots$ sorozat $|\psi\rangle$ -hez konvergál, ha a $\| |\psi_1\rangle - |\psi\rangle \|, \| |\psi_2\rangle - |\psi\rangle \|, \dots$ számsorozat nullához konvergál
- Legyen $\mathcal{A}$ a Hilbert-tér részhalmaza. A $\mathcal{H}$ Hilbert-tér valamely pontját az $\mathcal{A}$ halmaz határpontjának nevezzük, ha van olyan $\mathcal{A}$ -ban fekvő sorozat, amely ehhez a ponthoz konvergál. Az $\mathcal{A}$ halmazt zártnak nevezzük, ha tartalmazza valamennyi határpontját. Az $\mathcal{A}$ halmazt a Hilbert-térben mindenütt sűrűnek nevezzük, ha határpontjainak halmaza éppen $\mathcal{H}$. (Az utóbbi azt jelenti, hogy a Hilbert-tér minden pontjához található olyan $\mathcal{A}$ -ban fekvő sorozat, ami ehhez a ponthoz konvergál.)
- A $\mathcal{H}$ Hilbert-tér $\mathcal{M}$ részhalmazát lineáris sokaságnak nevezzük, ha $\mathcal{M}$ bármely k számú ($k = 1, 2, \dots$) $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots$ eleméből képezett összes $c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle + \dots + c_k|\psi_k\rangle$ lineáris kombinációt tartalmazza $\mathcal{M}$, ahol $c_1, c_2, \dots, c_k$ tetszőleges komplex számok. Legyen $\mathcal{A}$ a $\mathcal{H}$ -nak részhalmaza, akkor az $a_1|\psi_1\rangle + a_2|\psi_2\rangle + \dots + a_k|\psi_k\rangle$ lineáris kombinációk halmaza ($k = 1, 2, \dots, |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_k\rangle \in \mathcal{A}$ és $a_1, a_2, \dots, a_k \in \mathbb{C}$) lineáris sokaság: az $\mathcal{A}$ részhalmaz által kifeszített $\{\mathcal{A}\}$ lineáris sokaság. Ha $\{\mathcal{A}\}$ -hoz hozzávesszük valamennyi határpontját, akkor az $\mathcal{A}$ által kifeszített $[\mathcal{A}]$ zárt lineáris sokaságot kapjuk. Definíciójából adódóan $[\mathcal{A}]$ tartal-

mazza $\mathcal{A}$ -t, és egyúttal minden $\mathcal{A}$ -t tartalmazó zárt lineáris sokaságnak részhalmaza¹⁴³.

Be lehet látni, hogy a számmal szorzás, a vektorok összeadása és a belső szorzat minden változójukban folytonos műveletek.

Vegyük észre, hogy azok az F függvények, amelyeknek értelmezési tartománya és értékkészlete is $\mathcal{H}$ részhalmaza, operátorok. A fent elmondottak szerint beszélhetünk tehát operátorok folytonosságáról, korlátosságáról és operátorok sorozatának konvergenciájáról.

A Hilbert-tér geometriája szempontjából fontos a belső szorzat segítségével értelmezett ortogonalitás és a vele kapcsolatos fogalmak. A $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ vektorok ortogonálisak, ha $\langle\phi|\psi\rangle = 0$. Az $\mathcal{M}$ és a $\mathcal{N}$ lineáris sokaság ortogonális, ha $\mathcal{M}$ bármely eleme ortogonális $\mathcal{N}$ bármely elemére. Valamely $\mathcal{D}$ halmazt ortonormálnak nevezünk, ha bármely elemének hossza (normája) 1-gyel egyenlő és bármely két eleme ortogonális. A $\mathcal{D}$ ortonormált halmazt teljesnek nevezzük, ha nem valódi részhalmaza egyetlen ortonormált halmaznak sem. Ez azt jelenti, hogy nincsen olyan $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, $\| |\psi\rangle \| = 1$, amely ortogonális lenne $\mathcal{D}$ -re. A teljes ortonormált rendszerek fontos szerepet játszanak. Véges, d -dimenziós Hilbert-térben a lineárisan független vektorok maximális száma d , továbbá a Hilbert-tér 1. és 2. tulajdonsága együttesen biztosítja, hogy bármely ortonormált rendszer elemeinek száma $\leq d$, és akkor és csak akkor teljes, ha az elemeinek száma pontosan d . Másképpen szólva: a d -dimenziós Hilbert-térben bármely ortonormált rendszer lineárisan független és, ha elemeinek száma d , akkor teljes is. Véges, $\dim \mathcal{H} = d$ dimenziójú Hilbert-tér esetén létezik $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_d\rangle\} \subset \mathcal{H}$ ortonormált teljes rendszer (bázis), amelyre teljesül az ortonormáltsági feltétel,

$$\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{n,m}, \quad (n, m = 1, 2, \dots, d) \quad (\text{E.3})$$

és a teljességi feltétel, azaz hogy $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ esetén

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^d c_n |\varphi_n\rangle, \quad (\text{E.4})$$

ahol $c_n = \langle\varphi_n|\psi\rangle$ a kifejtési együtthatók.

Ha a Hilbert-tér végtelen dimenziójú, akkor az ortonormált teljes rendszer létezésének további feltételei vannak:

¹⁴³Később használni fogjuk a bevezetett jelölések kiterjesztését: $\{\mathcal{A}, \mathcal{B}, \dots, |\psi\rangle, |\phi\rangle, \dots\}$, ill. $[\mathcal{A}, \mathcal{B}, \dots, |\psi\rangle, |\phi\rangle, \dots]$ rendre az $\mathcal{A} \cup \mathcal{B} \cup \dots \cup |\psi\rangle \cup |\phi\rangle \cup \dots$ halmaz által kifeszített lineáris sokaságot, ill. annak lezártját.

3. A $\mathcal{H}$ Hilbert-tér teljes, azaz benne minden Cauchy-sorozat konvergál. Az állapotvektorok $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots |\varphi_n\rangle, \dots$ megszámlálhatóan végtelen sorozatát Cauchy-sorozatnak nevezzük, ha tetszőlegesen kicsiny $\varepsilon > 0$ esetén létezik olyan N természetes szám, hogy $n, m > N$ esetén $\| |\varphi_n\rangle - |\varphi_m\rangle \| < \varepsilon$. A teljesség azt jelenti, hogy minden Cauchy-sorozathoz létezik olyan $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, amelyhez a sorozat (normában) konvergál.

Felmerül a kérdés, hogy fordítva is igaz-e, hogy $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ esetén létezik-e olyan sorozat, amely $|\psi\rangle$ -hez konvergál? Ezt biztosítja a következő tulajdonság.

4. A $\mathcal{H}$ Hilbert-tér szeparábilis, ami azt jelenti, hogy a Hilbert-térben létezik olyan $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots$ megszámlálható számosságú sorozat, amely mindenütt sűrű $\mathcal{H}$ -ban. Utóbbi azt jelenti, hogy tetszőleges $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ és tetszőleges $\varepsilon > 0$ esetén van a sorozatnak legalább egy olyan $|\varphi_n\rangle$ eleme, amelyre $\| |\varphi_n\rangle - |\psi\rangle \| < \varepsilon$.

E.2. A Hilbert-tér geometriája

E.2.1. Ortonormált rendszerek

A 3. és 4. tulajdonság biztosítja, hogy végtelen dimenziós Hilbert-térben is létezik ortonormált teljes rendszer, amely szerint a Hilbert-tér tetszőleges vektora kifejtethető. Végtelen dimenziós Hilbert-térben valamely ortonormált rendszer véges vagy megszámlálhatóan végtelen sok elemű sorozat, és ha teljes, akkor végtelen sok eleme van. Az ortonormált rendszer elemeinek végtelen száma azonban nem elégséges ahhoz, hogy az ortonormált rendszer teljes legyen. (Ez másképpen van, mint véges dimenziós Hilbert-tér esetén, amikor az ortonormált rendszer elemeinek maximális száma biztosítja a teljességet.) A $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots$ ortonormált rendszer segítségével képezett $\sum_n \langle \phi | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \psi \rangle$ sor, ahol $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ tetszőlegesek, abszolút konvergencia, amennyiben tagjainak száma végtelen, továbbá, ha $|\psi\rangle = |\phi\rangle$, akkor $\sum_n |\langle \varphi_n | \psi \rangle|^2 \leq \| |\psi\rangle \|^2$ (itt $\sum_n$ kiterjedhet véges vagy végtelen sok tagra). A $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots$ ortonormált rendszer segítségével képezett $\sum_{n=1}^{\infty} c_n |\varphi_n\rangle$ sor akkor és csak akkor konvergencia, ha a $\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2$ sor konvergál. Ha $\sum_n c_n |\varphi_n\rangle = |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ (az összegzés kiterjedhet véges vagy végtelen sok tagra), akkor $c_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle$. Legyen $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ tetszőleges és $c_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle$, akkor a $|\psi'\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle$ összeg mindig konvergencia, ha a sor végtelen; a $|\psi\rangle - |\psi'\rangle$ különbség pedig ortogonális az ortonormált rendszerre. A $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots$ ortonormált rendszer teljességének szükséges és elégséges feltétele többféleképpen is megfogalmazható:

- A $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots$ ortonormált rendszer által kifeszített $[|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots]$ zárt lineáris sokaság megegyezik $\mathcal{H}$ -val.
- Bármely $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ vektor kifejtethető a $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots$ ortonormált rendszer sze-

rint,

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n |\varphi_n\rangle, \quad \text{ahol } c_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle. \quad (\text{E.5})$$

(Az előzőek értelmében a konvergencia biztosított.)

- Tetszőleges $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ esetén igaz, hogy

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \phi | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \psi \rangle, \quad (\text{E.6})$$

ahol az abszolút konvergencia az előzőek értelmében biztosított.

Kiolvashatjuk az (E.6) egyenlőségéből, hogy ha létezik ortonormált teljes rendszer $\mathcal{H}$ -ban, akkor az egységfelbontás

$$\hat{1} = \sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \quad (\text{E.7})$$

alakban írható. Meg lehet mutatni, hogy tetszőleges (véges vagy végtelen dimenziós) Hilbert-térben bármely $\mathcal{M}$ zárt lineáris sokasághoz található olyan ortonormált rendszer, amely kifeszíti $\mathcal{M}$ -et. A $\mathcal{H}$ Hilbert-tér viszont maga is zárt lineáris sokaság, úgyhogy *létezik* a Hilbert-térben ortonormált teljes rendszer.

E.2.2. Zárt lineáris sokaságok és projektoraik

A végtelen dimenziós Hilbert-térben a zárt lineáris sokaságok a megfelelői azoknak a geometriai elemeknek, amik $\mathbb{R}_n$ -ben az egyenes, a sík, stb. Legyen $\mathcal{M}$ részhalmaza $\mathcal{H}$ -nak, és jelöljük $\mathcal{R} - \mathcal{M}$ -mel $\mathcal{R}$ mindazon elemeinek halmazát, amelyek ortogonálisak $\mathcal{M}$ minden elemére; ekkor $\mathcal{R} - \mathcal{M}$ zárt lineáris sokaság: $\mathcal{M}$ -nek $\mathcal{R}$ -re nézve ortogonális komplementer zárt lineáris sokasága.

Vannak nevezetes zárt lineáris sokaságok:

- maga a Hilbert-tér, $\mathcal{H}$;
- az egyetlen elemként a nullvektort tartalmazó $\{|0\rangle\} = [|0\rangle]$ halmaz;
- a $\{|\psi\rangle\} = [|\psi\rangle]$ zárt lineáris sokaság: a $c|\psi\rangle$ alakú elemek halmaza, ahol $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ rögzített vektor és $c \in \mathbb{C}$ tetszőleges komplex szám).

Ahogy az euklideszi geometriában, ugyanúgy a $\mathcal{H}$ Hilbert-térben is lehet vezetni a vetítés (projekció) fogalmát. Legyen $\mathcal{M}$ zárt lineáris sokaság, akkor

tetszőleges $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ egyértelműen felbontható $|\psi\rangle = |\phi\rangle + |\varphi\rangle$ alakban, ahol $|\phi\rangle \in \mathcal{M}$ és $|\varphi\rangle \in \mathcal{R} - \mathcal{M}$. Itt $|\phi\rangle$ a $|\psi\rangle$ projekciója $\mathcal{M}$ -re, jelölése $|\phi\rangle = \hat{P}_{\mathcal{M}}|\psi\rangle$; az $\mathcal{M}$ -re merőleges $|\varphi\rangle$ pedig $|\psi\rangle$ -nek az $\mathcal{M}$ -re merőleges komponense. A $\hat{P}_{\mathcal{M}}$ projektor operátor (röviden projektor) a Hilbert-téren mindenütt értelmezve van és az alábbi tulajdonságokkal rendelkezik:

- lineáris:

$$\hat{P}_{\mathcal{M}}\left(\sum_{i=1}^n c_i |\psi_i\rangle\right) = \sum_{i=1}^n c_i \hat{P}_{\mathcal{M}}|\psi_i\rangle, \quad (\text{E.8})$$

ahol $n = 1, 2, \dots$,

- hermitikus:

$$(\hat{P}_{\mathcal{M}}\phi, \psi) = (\phi, \hat{P}_{\mathcal{M}}\psi) = \langle \phi | \hat{P}_{\mathcal{M}} | \psi \rangle, \quad (\text{E.9})$$

- idempotens,

$$\hat{P}_{\mathcal{M}}(\hat{P}_{\mathcal{M}}|\psi\rangle) = \hat{P}_{\mathcal{M}}|\psi\rangle, \quad (\text{E.10})$$

avagy rövidebben $\hat{P}_{\mathcal{M}}^2 \equiv \hat{P}_{\mathcal{M}}\hat{P}_{\mathcal{M}} = \hat{P}_{\mathcal{M}}$.

A $\hat{P}_{\mathcal{M}}$ projektor értékkészlete $\mathcal{M}$, azaz a $\hat{P}_{\mathcal{M}}|\psi\rangle$ alakú elemek halmaza. Az $\mathcal{M}$ zárt lineáris sokaság úgy is jellemezhető, mint a $\hat{P}_{\mathcal{M}}|\psi\rangle = |\psi\rangle$ összes megoldásainak halmaza, az $\mathcal{R} - \mathcal{M}$ pedig a $\hat{P}_{\mathcal{M}}|\psi\rangle = |0\rangle$ összes megoldásainak halmaza. Valamely $\hat{E}$ lineáris operátor akkor és csak akkor projektora valamilyen $\mathcal{M}$ zárt lineáris sokaságnak (azaz $\hat{E} = \hat{P}_{\mathcal{M}}$), ha $(\hat{E}\psi, \phi) = (\psi, \hat{E}\phi)$ és $\hat{E}^2 = \hat{E}$. Ekkor $\hat{E}$ egyértelműen meghatározza $\mathcal{M}$ -et (mindazon vektorok halmaza, amelyekre $\hat{E}|\psi\rangle = |\psi\rangle$). Érdeemes észrevenni, hogy

$$\hat{P}_{\mathcal{H}-\mathcal{M}} = \hat{1} - \hat{P}_{\mathcal{M}}, \quad \hat{P}_{\mathcal{H}-(\mathcal{H}-\mathcal{M})} = \hat{1} - \hat{P}_{\mathcal{H}-\mathcal{M}} = \hat{P}_{\mathcal{M}}, \quad (\text{E.11})$$

ahol az utóbbi egyenlőség azt jelenti, hogy $\mathcal{M}$ és $\mathcal{H} - (\mathcal{H} - \mathcal{M})$ azonosak. Tetszőleges $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ esetén igaz, hogy

$$\|\hat{E}|\psi\rangle\|^2 = \langle \psi | \hat{E} | \psi \rangle, \quad \|\hat{E}|\psi\rangle\| \leq \|\psi\|; \quad (\text{E.12})$$

továbbá $\|\hat{E}|\psi\rangle\| = \|\psi\|$ akkor és csak akkor, ha $|\psi\rangle \in \mathcal{M}$, és $\|\hat{E}|\psi\rangle\| = 0$ akkor és csak akkor, ha $|\psi\rangle \in \mathcal{H} - \mathcal{M}$. Az $\hat{E}$ projektor folytonos.

Legyen $\hat{E}$ és $\hat{F}$ rendre az $\mathcal{M}$ és $\mathcal{N}$ zárt lineáris sokasághoz tartozó projektor. Ekkor az $\hat{E}\hat{F}$ operátor akkor és csak akkor projektor, ha $\hat{E}$ és $\hat{F}$ felcserélhető egymással, azaz $\hat{E}\hat{F} = \hat{F}\hat{E}$; ilyenkor $\hat{E}\hat{F}$ az $\mathcal{M}$ és $\mathcal{N}$ közös elemeiből álló $\mathcal{P}$ zárt lineáris sokaság projektora. Az $\hat{E} + \hat{F}$ operátor pedig akkor és csak akkor projektor,

ha $\hat{E}\hat{F} = \hat{F}\hat{E} = 0$; ekkor $\mathcal{M}$ ortogonális $\mathcal{N}$ -re és $\hat{E} + \hat{F}$ az $\mathcal{M} + \mathcal{N} \equiv [\mathcal{M}, \mathcal{N}]$ zárt lineáris sokaságra vetítő projektor, és ebben az esetben $\{\mathcal{M}, \mathcal{N}\} = [\mathcal{M}, \mathcal{N}]$. Az $\hat{E} - \hat{F}$ akkor és csak akkor projektor, ha $\hat{E}\hat{F} = \hat{F}$ (vagy ami ugyanaz $\hat{F}\hat{E} = \hat{F}$); ekkor $\mathcal{N}$ részhalmaza $\mathcal{M}$ -nek, és $\hat{E} - \hat{F}$ az $\mathcal{M} - \mathcal{N}$ projektora. Ha $\mathcal{N}$ részhalmaza $\mathcal{M}$ -nek, akkor azt mondjuk az $\hat{E} = \hat{P}_{\mathcal{M}}$ és $\hat{F} = \hat{P}_{\mathcal{N}}$ projektorokra, hogy $\hat{E} \geq \hat{F}$ vagy $\hat{F} \leq \hat{E}$, ami azt jelenti, hogy $\hat{E}\hat{F} = \hat{F}$ vagy $\hat{F}\hat{E} = \hat{F}$, és a felcserélhetőség következmény. Mindig igaz:

- $\hat{0} \leq \hat{E} \leq \hat{1}$;
- ha $\hat{E} \leq \hat{F}$ és $\hat{F} \leq \hat{E}$, akkor $\hat{E} = \hat{F}$ (és ekkor $\mathcal{M}$ azonos $\mathcal{N}$ -nel);
- ha $\hat{E} \leq \hat{G}$ és $\hat{G} \leq \hat{F}$, akkor $\hat{E} \leq \hat{F}$

A " $\leq$ " reláció tehát a nagyság szerinti rendezés tulajdonságaival rendelkezik. Az alábbi három állítás egyenértékű: (a) $\hat{E} \leq \hat{F}$, (b) $\hat{1} - \hat{E} \geq \hat{1} - \hat{F}$, és (c) $\hat{E}$ ortogonális $\hat{1} - \hat{F}$ -re, azaz $\hat{E}(\hat{1} - \hat{F}) = \hat{0}$. Továbbá, ha $\hat{E}$ és $\hat{F}$ ortogonális (azaz $\hat{E}\hat{F} = \hat{0}$) és $\hat{E}' \leq \hat{E}$ és $\hat{F}' \leq \hat{F}$, akkor $\hat{E}'$ és $\hat{F}'$ is ortogonális, azaz $\hat{E}'\hat{F}' = \hat{0}$. A projektorok ortogonalitása, illetve felcserélhetősége esetén a hozzájuk tartozó zárt lineáris sokaságok ortogonalitásáról, illetve felcserélhetőségéről beszélhetünk.

Meg lehet mutatni, hogy $\hat{E} \leq \hat{F}$ egyenértékű azzal, hogy $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ esetén $\|\hat{E}|\psi\rangle\| \leq \|\hat{F}|\psi\rangle\|$. Ha $\hat{E}_1, \hat{E}_2, \dots, \hat{E}_n$ projektorok, akkor annak a szükséges és elégsége feltétele, hogy $\hat{E}_1 + \dots + \hat{E}_n$ is projektor, kétféleképpen is megfogalmazható: (a) a szóban forgó $\hat{E}_k$ projektorok páronként ortogonálisak egymásra; (b) az

$$\|\hat{E}_1|\psi\rangle\|^2 + \dots + \|\hat{E}_n|\psi\rangle\|^2 \leq \|\psi\|^2 \quad (\text{E.13})$$

egyenlőtlenség minden $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ esetén fennáll. Ha $\hat{E}_1 + \dots + \hat{E}_n$ projektor, ahol $\hat{E}_k = \hat{P}_{\mathcal{M}_k}$, akkor $\hat{E}_1 + \dots + \hat{E}_n$ az $\mathcal{M}_1 + \dots + \mathcal{M}_n = [\mathcal{M}_1 + \dots + \mathcal{M}_n]$ projektora, és $[\mathcal{M}_1 + \dots + \mathcal{M}_n] = \{\mathcal{M}_1 + \dots + \mathcal{M}_n\}$. Projektorok növekvő, illetve csökkenő sorozatáról beszélünk, ha $\hat{E}_1 \leq \hat{E}_2 \leq \dots$, illetve $\hat{E}_1 \geq \hat{E}_2 \geq \dots$; az ilyen sorozatok mindig konvergensek, vagyis ilyenkor létezik olyan $\hat{E}$ projektor, hogy $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ esetén $\hat{E}_n|\psi\rangle \rightarrow \hat{E}|\psi\rangle$, és minden n -re $\hat{E}_n \leq \hat{E}$, illetve $\hat{E}_n \geq \hat{E}$.

E.3. Operátorok

Az $\hat{O}$ operátorok a Hilbert-tér valamely $\mathcal{D}(\hat{O})$ részhalmazán értelmezett függvények, amelyeknek az $\mathcal{R}(\hat{O})$ értékkészlete szintén a Hilbert-tér valamely részhalmaza. Az $\hat{O}$ operátor tehát a Hilbert-tér bizonyos $|\psi\rangle \in \mathcal{D}(\hat{O})$ elemeihez egyértelműen hozzárendeli a Hilbert-tér valamely $\hat{O}|\psi\rangle \in \mathcal{R}(\hat{O})$ elemeit; az értelmezési tartomány és az értékkészlet is $\mathcal{H}$ részhalmaza. Az értelmezési tartomány nem feltétlenül egyezik meg a teljes Hilbert-térrel, de ha igen, akkor azt mondjuk, hogy az operátor mindenütt értelmezve van. Az operátor értékkészlete sem feltétlenül egyezik meg az értelmezési

tartományával, így pl. az $\hat{O}^2 \equiv \hat{O}\hat{O}$ operátor nem biztos, hogy értelmezve van. Az operátorok összeadása, számmal szorzása, szorzása egymással és hatványozása, az alábbiak szerint van értelmezve:

$$(\hat{A} \pm \hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle + \hat{B}|\psi\rangle, \quad (c\hat{A})|\psi\rangle = c\hat{A}|\psi\rangle, \quad (\hat{A}\hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle), \\ \hat{A}^0|\psi\rangle \equiv \hat{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle, \quad \hat{A}^2|\psi\rangle = \hat{A}\hat{A}|\psi\rangle, \dots, \hat{A}^n|\psi\rangle = \underbrace{\hat{A}\hat{A}\dots\hat{A}}_{n\text{-szer}}|\psi\rangle. \quad (\text{E.14})$$

Általában az operátorok szorzása nem kommutatív művelet: $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Természetesen ahhoz, hogy megállapítsuk, hogy adott operátorok esetén van-e értelme a fenti műveleteknek, gondosan nyomon kell követni az egyes operátorok értelmezési tartományait és szorzás, hatványozás esetén az értékkészleteiket is. Ilen szempontból nagy könnyebbséget jelent, ha az egyes műveleteken szereplő operátorok mindenütt, vagy legalább mindenütt sűrűn vannak értelmezve a Hilbert-téren.

Ha a $\hat{O}$ operátor bármely értékét csak egyszer veszi fel, akkor létezik az inverze: $\hat{O}^{-1}$; a $\hat{O}^{-1}$ operátor akkor van értelmezve a $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ vektoron, ha a $\hat{O}|\phi\rangle = |\psi\rangle$ egyenletnek létezik egyértelmű $|\phi\rangle$ megoldása, ekkor $\hat{O}^{-1}|\psi\rangle = |\phi\rangle$. Érvényesek az alábbi szabályok:

$$(c\hat{A})^{-1} = \frac{1}{c}\hat{A}^{-1} \quad (\text{ha } c \neq 0), \quad (\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}, \quad (\text{E.15})$$

ha léteznek rendre az $\hat{A}^{-1}$, ill. az $\hat{A}^{-1}, \hat{B}^{-1}$ inverz-operátorok. A $\hat{A}$ operátor negatív egész kitevős hatványain a $\hat{A}^{-1}$ operátor megfelelő pozitív egész kitevős hatványait értjük, ha létezik $\hat{A}^{-1}$.

Az $\hat{A}$ operátort lineáris operátornak nevezzük, ha az értelmezési tartománya lineáris sokaság, vagyis a $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_n\rangle$ vektorokkal együtt tartalmazza az összes $c_1|\psi_1\rangle + \dots + c_n|\psi_n\rangle$ alakú lineáris kombinációkat is, és érvényes, hogy

$$\hat{A}(c_1|\psi_1\rangle + \dots + c_n|\psi_n\rangle) = c_1\hat{A}|\psi_1\rangle + \dots + c_n\hat{A}|\psi_n\rangle \quad (\text{E.16})$$

(az értelmezési tartományból tetszőlegesen választott tetszőleges $n \geq 1$ darab vektor esetén). A kvantummechanikában csak lineáris operátorokkal lesz dolgunk, azok közül is csak olyanokkal, amelyeknek az értelmezési tartománya mindenütt sűrű a $\mathcal{H}$ Hilbert-térben. Az utóbbi sokszor kielégítően helyettesíti azt a követelményt, hogy az operátor mindenütt értelmezve van.¹⁴⁴ Ha $\hat{A}$ és $\hat{B}$ értelmezési tartománya mindenütt sűrű, akkor képezhető $\hat{A} \pm \hat{B}$.

¹⁴⁴Pl. az $L_2(\mathbb{R}, dq)$ Hilbert-térben (azaz az 1-dimenziós rendszerek négyzetesen integrálható hullámfüggvényeinek terében a $\hat{q}$ koordináta-operátor és a $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}$ impulzus-operátor lineáris operátorok, de nincsenek mindenütt értelmezve, hiszen $q\psi(q)$ és $\partial\psi/\partial q$ általában nem négyzetesen integrálható, ha $\psi(q)$ az is. Ugyanakkor a koordináta- és impulzus-operátorok értelmezve vannak a Schwartz-téren, ami mindenütt sűrű a $\mathcal{H}$ Hilbert-térben. A pontos matematikai definíciót megkerülve, a Schwartz-tér olyan függvények halmaza, amelyeknek akárhányadik deriváltja a $|q| \rightarrow \infty$ határesetben gyorsabban tart zérushoz, mint $1/|q|$ bármelyik pozitív hatványa.

Az $\hat{A}^\dagger$ operátort az $\hat{A}$ operátor adjungáltjának nevezzük, ha $\hat{A}^\dagger$ és $\hat{A}$ értelmezési tartománya megegyezik és ott

$$\langle \phi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle^*. \quad (\text{E.17})$$

Az $\hat{A}$ és $\hat{A}^\dagger$ közti reláció szimmetrikus, úgyhogy $\hat{A}^\dagger$ adjungáltja $\hat{A}$: $\hat{A}^{\dagger\dagger} = \hat{A}$. Az adjungált operátort a fenti definíció egyértelműen határozza meg. Az $\hat{A}$ operátort önadjungáltnak, másképpen hermitikus operátornak nevezzük, ha azonos az adjungáltjával: $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$; ekkor

$$\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle^*. \quad (\text{E.18})$$

A $\hat{0}$, $\hat{1}$ és minden $\hat{E}$ projektor-operátor önadjungált. Érvényesek továbbá az alábbi szabályok:

$$\begin{aligned} (c\hat{A})^\dagger &= c^* \hat{A}^\dagger, \\ (\hat{A} \pm \hat{B})^\dagger &= \hat{A}^\dagger \pm \hat{B}^\dagger, \text{ ha képezhető } \hat{A} \pm \hat{B}, \\ (\hat{A}\hat{B})^\dagger &= \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \text{ (az értelmezési tartományok megfelelő korlátozásával),} \\ (\hat{A}^{-1})^\dagger &= (\hat{A}^\dagger)^{-1} \equiv \hat{A}^{\dagger-1}. \end{aligned} \quad (\text{E.19})$$

Ha $\hat{A}$ önadjungált operátor, akkor $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ valós $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{D}(\hat{A})$ esetén. Az $\hat{A}$ önadjungált operátor definit (másképpen pozitív szemidefinit), ha $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{D}(\hat{A})$ vektorra teljesül a $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \geq 0$ egyenlőtlenség.

Az $\hat{U}$ operátor unitér, ha $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}$ (ahonnan következik, hogy $\hat{U}$ és $\hat{U}^\dagger$ mindenütt értelmezve van, akárcsak az egységoperátor); ekkor

$$(\hat{U}|\phi\rangle, \hat{U}|\psi\rangle) = (|\phi\rangle, \hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi\rangle) = (|\phi\rangle, |\psi\rangle), \quad (\text{E.20})$$

vagyis az unitér operátor megőrzi a belső szorzatot (és következésképpen a vektorok normáját és ortogonalitását is). Fordítva, az (E.20) tulajdonságból következik, hogy $\hat{U}$ unitér, ha mindenütt értelmezve van $\mathcal{H}$ -n. Az unitér-operátorok mindig folytonosak, mert $\|\hat{U}|\psi\rangle - \hat{U}|\phi\rangle\| = \|\hat{U}(|\psi\rangle - |\phi\rangle)\| = \| |\psi\rangle - |\phi\rangle \|$. Ugyanez azonban általában nem mondható el az hermitikus operátorokról.¹⁴⁵

Ha $\hat{U}$ és $\hat{V}$ unitér, akkor $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$ és $\hat{U}\hat{V}$ is unitér, továbbá $\hat{U}$ minden hatványa unitér. Ha $\hat{A}$ hermitikus, akkor $\hat{A}$ minden hatványa és minden valós együtthatós polinomja is hermitikus.¹⁴⁶ Ha $\hat{A}$ és $\hat{B}$ hermitikus operátorok, akkor $\hat{A}\hat{B}$ csak akkor hermitikus, ha $\hat{A}$ és $\hat{B}$ felcserélhetők egymással, azaz $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Ha $\hat{A}$ hermitikus, akkor tetszőleges $\hat{O}$ esetén $\hat{O}\hat{A}\hat{O}^\dagger$ is hermitikus; így (az $\hat{A} = \hat{1}$ helyettesítéssel) $\hat{O}\hat{O}^\dagger$ és ($\hat{O} \leftrightarrow \hat{O}^\dagger$ cserével) $\hat{O}^\dagger\hat{O}$ is hermitikusak; továbbá ha $\hat{U}$ unitér, akkor $\hat{U}\hat{A}\hat{U}^{-1}$ is hermitikus.

¹⁴⁵Pl. a q koordináta-operátor és a $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}$ impulzus-operátor nem folytonosak a négyzetesen integrálható hullámfüggvények tere felett.

¹⁴⁶Pl. az $L_2(\mathbb{R}, dq)$ Hilbert-téren a q koordináta-operátor és a $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}$ impulzus-operátor hermitikus.

A lineáris operátorok folytonossága hasonlóan fontos tulajdonság, mint a függvények folytonossága az analízisben. A folytonosság szükséges és elégséges feltételének ekvivalens megfogalmazásai:

- az $\hat{O}$ lineáris operátor mindenütt folytonos, ha $|\psi\rangle = |0\rangle$ -ban folytonos;
- az $\hat{O}$ lineáris operátor folytonos akkor és csak akkor, ha $\hat{O}$ korlátos, azaz ha minden $|\psi\rangle \in \mathcal{D}(\hat{O})$ esetén létezik olyan $C \geq 0$ állandó, hogy $\|\hat{O}|\psi\rangle\| \leq C\| |\psi\rangle \|$;
- az $\hat{O}$ lineáris operátor folytonos akkor és csak akkor, ha minden $|\psi\rangle$ és $|\phi\rangle$ esetén $|\langle \hat{O}|\psi\rangle, |\phi\rangle\rangle| \leq C\| |\psi\rangle \| \| |\phi\rangle \|$. Ha $\hat{A}$ hermitikus, akkor ezt csak $|\phi\rangle = |\psi\rangle$ -re kell megkövetelni: $|\langle \psi|\hat{A}|\psi\rangle| \leq C\| |\psi\rangle \|^2$, amit írhatunk $-C\| |\psi\rangle \|^2 \leq \langle \psi|\hat{A}|\psi\rangle \leq C\| |\psi\rangle \|^2$ alakba is, mert $\langle \psi|\hat{A}|\psi\rangle$ valós.¹⁴⁷

Ha $\hat{A}$ hermitikus és definit, akkor fennáll a

$$|\langle \phi|\hat{A}|\psi\rangle| \leq \sqrt{\langle \psi|\hat{A}|\psi\rangle \langle \phi|\hat{A}|\phi\rangle} \quad (\text{E.21})$$

egyenlőtlenség minden $|\psi\rangle$ és $|\phi\rangle \in \mathcal{D}(\hat{A})$ esetén. Az (E.21) egyenlőtlenség következménye, hogy ha $\langle \psi|\hat{A}|\psi\rangle = 0$ és $\mathcal{D}(\hat{A})$ mindenütt sűrű $\mathcal{H}$ -ban, akkor fennáll, hogy $\hat{A}|\psi\rangle = |0\rangle$.

A felcserélhetőség fontos szerepet játszik a kvantummechanikában. Ha $\hat{A}$ és $\hat{B}$ felcserélhetőek, akkor $\hat{A}$ felcserélhető $\hat{B}$ minden hatványával, és ha létezik $\hat{B}^{-1}$, akkor $\hat{A}$ felcserélhető $\hat{B}^{-1}$ minden hatványával is. Továbbá, ha $\hat{A}$ felcserélhető $\hat{B}$ -vel és $\hat{C}$ -vel, akkor felcserélhető $c\hat{B}$ -vel, $\hat{B} \pm \hat{C}$ -vel és $\hat{B}\hat{C}$ -vel is. Ezek következménye, hogy ha $\hat{A}$ és $\hat{B}$ felcserélhetőek, akkor $\hat{A}$ minden polinomja felcserélhető $\hat{B}$ minden polinomjával; továbbá az $\hat{A} = \hat{B}$ esetet véve, $\hat{A}$ tetszőleges polinomjai felcserélhetők egymással.

E.4. Az L_2 és az ℓ_2 Hilbert-terek

Amikor az absztrakt Hilbert-tér ábrázolásairól beszéltünk, akkor megtanultuk, hogy az absztrakt $|\psi\rangle$ állapotvektorokat $\langle f|\psi\rangle \equiv \psi(f)$ hullámfüggvényekkel ábrázoljuk. Amennyiben az ábrázolás alapjául szolgáló fizikai mennyiség spektruma diszkrét, azaz az f változó csak diszkrét $f_1, f_2, \dots, f_n, \dots$ értékeket futhat be, akkor a megfelelő $|\varphi_n\rangle$ állapotvektorok ortonormált teljes rendszere szerint történik tetszőleges

¹⁴⁷Ha itt csak az egyik egyenlőtlenség áll fenn, akkor $\hat{A}$ alulról, ill. felülről korlátos. Minden definit $\hat{A}$ alulról korlátos, amikor is $C = 0$.

állapot kifejtése és a $c_n = \langle f_n | \psi \rangle = \psi(f_n)$ kifejtési együtthatók oszlopvektorba rendezhetők,

$$\underline{c} \equiv \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (\text{E.22})$$

amely megszámlálhatóan végtelen sok elemet tartalmaz, ha a Hilbert-tér végtelen dimenziós, és véges sok d darab elemet, ha $\dim \mathcal{H} = d$. Ilyenkor az absztrakt $|\psi\rangle$ vektorokat ezekkel az $\underline{c}$ oszlopvektorokkal ábrázoljuk. Ekkor a belső szorzat

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_n (c'_n)^* c_n, \quad \text{ha } |\phi\rangle = \sum_n c'_n |\varphi_n\rangle, \quad |\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle \quad (\text{E.23})$$

és a norma négyzete

$$\| |\psi\rangle \|^2 = \sum_n |c_n|^2 = 1 \quad (\text{E.24})$$

A (E.22) „oszlopvektorok” véges (E.23) belső szorzattal felruházott terét ℓ_2 Hilbert-térnek nevezzük.

A fizikában találkozunk olyan fizikai mennyiségekkel is, amelyek spektruma a kvantummechanikában is folytonos. Ilyen mennyiség pl. 1 szabadsági fokú rendszer esetén a q általános koordináta. Ilyenkor a hullámfüggvény a konfigurációs téren értelmezett $\langle q | \psi \rangle = \psi(q)$ függvény. Tipikus esetekben az értelmezési tartomány a valós számegyenes, vagy annak zárt $[a, b]$ intervalluma, a hullámfüggvény értékét pedig a komplex számok között veszi fel. Ekkor a Hilbert-tér a négyzetesen integrálható függvények $L_2(\mathbb{R}, dq)$ vagy $L_2([a, b], dq)$ tere, amelyekre a belső szorzat

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dq \phi^*(q) \psi(q), \quad \text{ill.} \quad \int_a^b dq \phi^*(q) \psi(q), \quad (\text{E.25})$$

véges. Az ilyen függvényeknek a normanégyzete is véges,

$$\| \psi \|^2 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dq |\psi(q)|^2 < \infty, \quad \text{ill.} \quad \int_a^b dq |\psi(q)|^2 < \infty. \quad (\text{E.26})$$

Tetszőleges $\hat{O}$ operátor mátrixeleme:

$$\langle \phi | \hat{O} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dq \phi^*(q) \hat{O} \psi(q), \quad \text{ill.} \quad \int_a^b dq \phi^*(q) \hat{O} \psi(q). \quad (\text{E.27})$$

Megjegyezzük, hogy az $\hat{O}$ operátor értelmezési tartománya azokra a négyzetesen integrálható $\psi(q)$ függvényekre terjed ki, amelyek esetében $\hat{O}\psi(q)$ is négyzetesen integrálható függvény, hiszen az operátornak L_2 -be vagy L_2 -re kell leképeznie.

Az s szabadsági fokú rendszer esetén a koordináta-hullámfüggvény szintén a konfigurációs téren értelmezett komplex értékű függvény: $\psi(q_1, \dots, q_s)$, amely négyzetesen integrálható, azaz $\psi \in L_2(\mathbb{R}^s, dq_1 \cdots dq_s)$.

A folytonos spektrumú f fizikai mennyiségek sajátérték-egyenletének formális megoldásai nem szolgáltatnak négyzetesen integrálható hullámfüggvényeket. Ilyen esetben külön kell foglalkoznunk avval, hogy a formális $|f\rangle$ sajátvektoroknak adhatunk-e olyan matematikai jelentést, hogy velük -alkalmas „normálás” után - hasonlóan számolhassunk, mint az 1-re normálható hullámfüggvényekkel. Mit is jelent a formális $\langle f|\psi\rangle$ belső szorzat matematikailag, hiszen a formális $|f\rangle$ jel most olyan valamit jelöl, ami nem eleme a $\mathcal{H}$ Hilbert-térnek. Erről a következő függelékben lesz szó.

F. A folytonos spektrumhoz tartozó nem valódi sajátvektorok

F.1. A saját differenciálok és a nem valódi sajátvektorok kapcsolata

Tegyük fel hogy $\hat{F}$ folytonos spektrummal rendelkező fizikai mennyiség operátora. Ekkor az

$$\hat{F}|F\rangle = F|F\rangle \quad (\text{F.1})$$

sajátértékegyenlet F folytonos sajátértékhez tartozó $|F\rangle$ formális megoldása nem eleme a $\mathcal{H}$ Hilbert-térnek, mert nem véges a normája; úgy nevezett **nem valódi sajátvektor**. Pontosabban szólva, ilyenkor maga a sajátértékegyenlet értelmezése sem tekinthető matematikailag jól definiáltnak. Ebben az esetben a sajátérték - feladat matematikailag pontos megfogalmazását először Neumann János adta meg [7].

Mi most nem követjük ezt a mély matematikai megfontolásokat igénylő utat. Csupán kézenfekvővé fogjuk tenni, hogy miért lehet a formális sajátértékegyenlet formális megoldásaival – megfelelő „normálás” után – hasonlóan számolni, mint igazi sajátvektorokkal. Induljunk ki ehhez abból, hogy a folytonos spektrumú F fizikai mennyiség $\hat{F}$ önadjungált operátora helyett olyan $\hat{F}^\Delta$ operátort tekintünk, amely diszkrét F_i sajátértékekkel rendelkezik, amelyekre $F_{i+1} - F_i = \Delta F > 0$ és az i diszkrét index $-\infty$ és $+\infty$ között változik: $i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Ilyen módon az F folytonos sajátértékek teljes tartományát, a valós számegyenesen nem átfedő $[F_i, F_i + \Delta F)$ intervallumokkal fedtük le. Ha a $\Delta F \rightarrow 0$ határátmenetet képezzük,

akkor visszkapjuk a folytonos spektrumú $\hat{F}$ mennyiséget. Mindaddig, amíg $\Delta F > 0$ véges (bár kicsiny) lépésköz, az $\hat{F}^\Delta$ diszkrét spektrumú operátor. Az F_i valós sajátértékekhez tartozó $|F_i, \Delta F\rangle$ állapotokról feltesszük, hogy ortonormált rendszert alkotnak,

$$\langle F_i, \Delta F | F_j, \Delta F \rangle = \delta_{i,j}. \quad (\text{F.2})$$

Ha bevezetjük a $\hat{P}_i^\Delta = |F_i, \Delta F\rangle \langle F_i, \Delta F|$ projektorokat, akkor a feltevéseinkkel definiált önadjungált operátor

$$\hat{F}^\Delta = \sum_i F_i \hat{P}_i^\Delta = \sum_i F_i |F_i, \Delta F\rangle \langle F_i, \Delta F|. \quad (\text{F.3})$$

A konstrukció biztosítja, hogy az $|F_i, \Delta F\rangle$ vektor az F_i sajátértékhez tartozó sajátvektora $\hat{F}^\Delta$ -nak,

$$\hat{F}^\Delta |F_i, \Delta F\rangle = F_i |F_i, \Delta F\rangle. \quad (\text{F.4})$$

Mivel a projektorok önadjungált operátorok, azért $\hat{F}^\Delta$ is önadjungált, azonban nem korlátos, mert $\|\hat{F}^\Delta |F_i, \Delta F\rangle\|^2 = |F_i|^2$ nem korlátos, ha i minden határon túl nő. Kérdés, hogy az $\{|F_i, \Delta F\rangle \mid i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots\}$ ortonormált rendszer teljes vagy sem. Másképpen fogalmazva, igaz-e, hogy tetszőleges $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ állapot előállítható alkalmas c_j kifejtési együtthatók segítségével $\sum_i c_i |F_i, \Delta F\rangle$ alakban. Ha ez igaz lenne, akkor az $|F_i, \Delta F\rangle$ állapotok ortonormáltsága miatt a kifejtési együtthatók $c_i = \langle F_i, \Delta F | \psi \rangle$ lennének.

Szeretnénk kapcsolatba hozni az $\hat{F}$ fizikai mennyiséghez tartozó nem valódi $|F\rangle$ sajátvektorokat az $\hat{F}_{\Delta F}$ operátornak a Hilbert-térben jól definiált $|F_i, \Delta F\rangle$ sajátvektoraival. A fizikai intuíció azt sugallja, hogy az $|F, \Delta F\rangle$ állapotot olyan állapotnak tekintjük, amelyben az $\hat{F}$ mennyiség az $[F, F + \Delta F)$ intervallumban veheti fel F' értékét, és csak az a feltevés látszik előítéletmentesnek, hogy minden ilyen F' értékhez tartozó $|F'\rangle$ „állapot” (nem valódi sajátvektor) azonos amplitúdóval van jelen az $|F, \Delta F\rangle$ állapotban, ha ΔF kicsi (határesetben tart a nullához), azaz, hogy $|F, \Delta F\rangle \propto \int_F^{F+\Delta F} dF' |F'\rangle$. Nyitott kérdés marad, hogy mi legyen a normálási együttható. Ezt a következő feltevéssel rögzíthetjük:

A $\Delta F \rightarrow 0$ határesetben annak a valószínűsége, hogy $\hat{F}$ az $[F_i, F_i + \Delta F)$ intervallumban veszi fel értékét tetszőleges $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ állapotban, egyezzen meg annak a valószínűségével, hogy $\hat{F}_{\Delta F}$ az F_i értéket veszi fel ugyanebben az állapotban, vagyis legyen

$$|\langle F_i, \Delta F | \psi \rangle|^2 = \int_{F_i}^{F_i + \Delta F} dF' |\langle F' | \psi \rangle|^2 \xrightarrow{\Delta F \rightarrow 0} \Delta F |\langle F | \psi \rangle|^2, \quad \text{ahol } F = F_i, \quad (\text{F.5})$$

mert az $[F_j, F_j + \Delta F)$ intervallum lényegében az egyetlen $F = F_j$ pontra húzódik össze a $\Delta F \rightarrow 0$ határesetben. Ezzel összhangban a normálási együtthatót $1/\sqrt{\Delta F}$ -

nek választjuk (egy lényegtelen komplex fázisfaktortól eltekintve). Az $|F, \Delta F\rangle$ állapotot tehát az alábbi módon definiáljuk,

$$|F, F + \Delta F\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta F}} \int_F^{F+\Delta F} dF' |F'\rangle. \quad (\text{F.6})$$

Ez a **Weyl-féle saját-differenciál**[4]. A továbbiakban a nem valódi sajátvektorok tulajdonságainak kiolvasásakor abból indulunk ki, hogy a saját-differenciál konstrukciójánál fogva eleme a Hilbert-térnek és ezért 1-re normálható, akármilyen $F \in (-\infty, \infty)$ értéket véve szerkesztjük meg. Ráadásul azt is feltesszük, hogy ha az $\{F_i | F_{i+1} - F_i = \Delta F, i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots\}$ diszkrét pontsorozathoz tartozó $|F_i, \Delta F\rangle$ vektorokat vesszük, azok ortonormált rendszert alkotnak, valamint, hogy ez az ortonormált vektorrendszer teljes is a $\Delta F \rightarrow 0$ határesetben. Utólag, amikor már megtaláltuk a nem valódi sajátvektorok tulajdonságait, belátjuk majd, hogy az $|F, \Delta F\rangle$ saját-differenciálok tulajdonságaira tett feltevéseinket visszkapjuk. Így meggyőződünk róla, hogy az eljárásunk ellentmondásmentes.

Feltevéseink alapján az (F.6) relációt úgy tekinthetjük, mint ami segít matematikai jelentést adni a **formális $|F\rangle$ nem valódi sajátvektoroknak**[5, 6]. A $\Delta F \rightarrow 0$ határesetben az (F.6) egyenlőség jobb oldalán álló integrál $\Delta F |F\rangle$ alakban közelíthető, ami azt sugallja, hogy a nem valódi sajátvektort az

$$|F\rangle = \lim_{\Delta F \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\Delta F}} |F, \Delta F\rangle, \quad (\text{F.7})$$

kapcsolatba hozhatjuk a saját-differenciállal. Ebben az esetben tetszőleges $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ állapotot ábrázolhatunk az F -ábrázolásban a

$$\psi(F) = \langle F | \psi \rangle = \lim_{\Delta F \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\Delta F}} \langle F, \Delta F | \psi \rangle \quad (\text{F.8})$$

hullámfüggvénnyel. Ezzel matematikai értelmet adunk az $|F\rangle$ nem valódi sajátvektor és a $|\psi\rangle$ állapotvektor belső szorzatának. Ha kihasználjuk, hogy a páronként diszjunkt intervallumokhoz tartozó $|F_i, \Delta F\rangle$ saját-differenciálok ortonormált teljes rendszert alkotnak a Hilbert-térben a $\Delta F \rightarrow 0$ határesetben, akkor tetszőleges $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ állapotvektort kifejezhetünk az $|F\rangle$ nem valódi sajátvektorok szerint is,

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \lim_{\Delta F \rightarrow 0} \sum_j \langle F_j, \Delta F \rangle \langle F_j, \Delta F | \psi \rangle = \lim_{\Delta F \rightarrow 0} \sum_F \Delta F |F\rangle \langle F| \\ &= \int dF \psi(F) |F\rangle. \end{aligned} \quad (\text{F.9})$$

Látjuk tehát, hogy az $|F\rangle$ nem valódi sajátvektorok úgy viselkednek, mintha teljes rendszert alkotnának, továbbá leolvashatjuk, hogy segítségükkel az egységfelbontás

$$\hat{1} = \int dF |F\rangle \langle F| \quad (\text{F.10})$$

alakot ölt. A nem valódi sajátvektorok „normálását” is meghatározhatjuk, ha képezzük a $\psi(F')$ hullámfüggvényt és a definíciójába besúrujuk a fenti egységfelbontást,

$$\psi(F') = \langle F' | \psi \rangle = \int dF \langle F' | F \rangle \langle F | \psi \rangle = \int dF \langle F' | F \rangle \psi(F), \quad (\text{F.11})$$

ahonnan adódik, hogy

$$\langle F' | F \rangle = \delta(F - F'). \quad (\text{F.12})$$

Tetszőleges $|\psi\rangle$ és $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ állapotok skalárszorzata szintén a szokásos alakban fejezhető ki az F -ábrázolásban használt hullámfüggvényekkel,

$$\begin{aligned} \langle \phi | \psi \rangle &= \int dF' \int dF \langle \phi | F' \rangle \langle F' | F \rangle \langle F | \psi \rangle = \int dF' \int dF \delta(F - F') \langle F' | \phi \rangle^* \langle F | \psi \rangle \\ &= \int dF \phi^*(F) \psi(F). \end{aligned} \quad (\text{F.13})$$

(Ez definíciójából adódóan véges, hiszen két Hilbert-térből vett vektor belső szorzata.) A fentiekkel tehát kézenfekvővé tettük, hogy a nem valódi sajátvektorokkal formálisan hasonlóan számolhatunk, mint az 1-re normálható sajátvektorokkal.

A nem valódi sajátvektorokra vonatkozó fenti formális számolási utasítások konzisztenciája mellett szól, hogy segítségükkel visszakaphatjuk a saját differenciál nem valódi sajátvektorok szerinti kifejtésének (F.6) alakját, amelyből kiindultunk. Az (F.10) egységfelbontás segítségével írhatjuk, hogy

$$|F_i, \Delta F\rangle = \hat{1} |F_i, \Delta F\rangle = \int dF' \langle F' | F_i, \Delta F \rangle |F'\rangle. \quad (\text{F.14})$$

Itt a jobb oldalon fellép a saját differenciál F -reprezentációban vett hullámfüggvénye,

$$\begin{aligned} \langle F | F_i, \Delta F \rangle &= \frac{1}{\sqrt{\Delta F}} \int_{F_i}^{F_i + \Delta F} dF' \langle F | F' \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta F}} \int_{F_i}^{F_i + \Delta F} dF' \delta(F' - F) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\Delta F}} \Theta(F_i + \Delta F - F) \Theta(F - F_i), \end{aligned} \quad (\text{F.15})$$

ahol $\Theta(x) = 1$, ha $x > 0$ és $= 0$, ha $x < 0$. Ezt visszahelyettesítve (F.14) jobb oldalába, visszakapjuk az (F.6) kifejezést, amiből kiindultunk,

$$|F_i, \Delta F\rangle = \int dF' |F'\rangle \frac{1}{\sqrt{\Delta F}} \Theta(F_i + \Delta F - F) \Theta(F - F_i) = \frac{1}{\sqrt{\Delta F}} \int_{F_i}^{F_i + \Delta F} dF' |F'\rangle. \quad (\text{F.16})$$

Ellenőriznünk kell még, hogy a nem valódi sajátvektorokra talált számolási szabályok továbbá a saját differenciálok és a nem valódi sajátvektorok közti kapcsolat

felhasználásával igazolódna-e csakugyan azok a feltevéseink, amiket az $\{F_i|F_{i+1} - F_i = \Delta F, i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots\}$ diszkrét pontsorozathoz tartozó $|F_i, \Delta F\rangle$ saját differenciálok ortonormáltságára tettünk. Vizsgáljuk meg ehhez először a tetszőleges F és F' értékekhez csatlakozó $\Delta F > 0$ szélességű intervallumokhoz tartozó saját differenciálok belső szorzatát:

$$\begin{aligned} I_{F,F'}^\Delta &\equiv \langle F, \Delta F | F', \Delta F \rangle = \frac{1}{\Delta F} \int_F^{F+\Delta F} df \int_{F'}^{F'+\Delta F} df' \langle f | f' \rangle \\ &= \frac{1}{\Delta F} \int_F^{F+\Delta F} df \Theta(F' + \Delta F - f) \Theta(f - F'). \end{aligned} \quad (\text{F.17})$$

Ha vagy $F' > F + \Delta F$, vagy $F' < F - \Delta F$ (nincs átfedése a két intervallumnak, amelyekre az integrálások történnek), akkor zérus az eredmény: $I_{F,F'}^\Delta = 0$. A nem átfedő intervallumokra vett saját differenciálok tehát ortogonálisak. Tehát az $\{F_i|F_{i+1} - F_i = \Delta F, i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots\}$ pontsorozathoz tartozó saját differenciálok is páronként ortogonálisak, ahogy feltettük. Ha $F' = F$ (a két intervallum pontosan fedésben van), akkor az integrál értéke $I_{F,F}^\Delta = 1$, vagyis a saját differenciálok 1-re normáltak, ahogy feltettük. Ha a két intervallum átfed, de nincsenek pontosan fedésben, akkor vagy $F < F' + \Delta F < F + \Delta F$ és $I_{F,F'}^\Delta = \frac{F' + \Delta F - F}{\Delta F} \in (0, 1)$, vagy $F' < F < F + \Delta F$ és $I_{F,F'}^\Delta = \frac{F + \Delta F - F'}{\Delta F} \in (0, 1)$. Azt sem nehéz megmutatnunk, hogy $\Delta F > 0$ esetén az $\{F_i|F_{i+1} - F_i = \Delta F, i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots\}$ pontsorozathoz tartozó saját differenciálok ortonormált rendszere nem teljes. Képezzük ehhez tetszőleges $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ állapotvektor segítségével a

$$\sum_i \langle F | F_i, \Delta F \rangle \langle F_i, \Delta F | \psi \rangle \quad (\text{F.18})$$

sort és mutassuk meg, hogy ez a sor konvergens, de nem a $\langle F | \psi \rangle$ hullámfüggvényt határozza meg, vagyis $\sum_i |F_i, \Delta F\rangle \langle F_i, \Delta F|$ nem az egységfelbontást adja. Felhasználva a saját differenciálok (F.6) definícióját és a nem valódi sajátvektorok (F.12)

„ortonormáltságot”, írhatjuk, hogy

$$\begin{aligned}
& \sum_i \langle F|F_i, \Delta F \rangle \langle F_i, \Delta F|\psi \rangle \\
&= \sum_i \frac{1}{\sqrt{\Delta F}} \int_{F_i}^{F_i+\Delta F} dF' \langle F|F' \rangle \langle F_i, \Delta F|\psi \rangle \\
&= \sum_i \frac{1}{\sqrt{\Delta F}} \int_{F_i}^{F_i+\Delta F} dF' \delta(F' - F) \langle F_i, \Delta F|\psi \rangle \\
&= \sum_i \frac{1}{\sqrt{\Delta F}} \Theta(F_i + \Delta F - F) \Theta(F - F_i) \langle F_i, \Delta F|\psi \rangle \\
&= \sum_i \frac{\Theta(F_i + \Delta F - F) \Theta(F - F_i)}{\sqrt{\Delta F}} \int_{-\infty}^{\infty} dF' \langle F_i, \Delta F|F' \rangle \langle F'|\psi \rangle \\
&= \sum_i \frac{\Theta(F_i + \Delta F - F) \Theta(F - F_i)}{\Delta F} \int_{-\infty}^{\infty} dF' \Theta(F_i + \Delta F - F') \Theta(F' - F_i) \langle F'|\psi \rangle \\
&= \sum_i \Theta(F_i + \Delta F - F) \Theta(F - F_i) \frac{1}{\Delta F} \int_{F_i}^{F_i+\Delta F} dF' \langle F'|\psi \rangle. \tag{F.19}
\end{aligned}$$

Az általánosság csorbítása nélkül mondhatjuk, hogy $F \in [F_j, F_j + \Delta F)$ a j -edik intervallum pontja, ezért a sor összege egyetlen tag járulékára egyszerűsödik, így konvergencia és értéke

$$\sum_i \langle F|F_i, \Delta F \rangle \langle F_i, \Delta F|\psi \rangle = \frac{1}{\Delta F} \int_{F_j}^{F_j+\Delta F} dF' \langle F'|\psi \rangle \neq \langle F|\psi \rangle \tag{F.20}$$

Ez azonban azt jelenti, hogy a folytonos spektrum tetszőlegesen kicsiny, de véges ΔF hosszúságú, páronként diszjunkt intervallumokkal történő lefedéséhez tartozó $|F_i, \Delta F\rangle$ saját-differenciálok ortonormált rendszere nem teljes, azaz az egységfelbontást nem tudjuk az általuk kifeszített alterek projektorainak összegeként megszerkeszteni: $\sum_i |F_i, \Delta F\rangle \langle F_i, \Delta F| \neq \hat{1}$. Ne feledjük el azonban, hogy a bevezetett $\hat{F}^\Delta$ operátor bár önadjungált, de nem korlátos; sajátvektorainak ortonormált rendszere nem szükségszerűen teljes.

F.2. A saját-differenciálok és a Neumann-féle spektrális előállítás kapcsolata

Tanulságos rávilágítani a Weyl-féle saját-differenciálok és a Neumann-féle spektrális felbontás [7] kapcsolatára, pontosabban különbségére. Neumann az $\hat{F}$ önadjungált operátor

$$\hat{F}|\psi\rangle = f|\psi\rangle \tag{F.21}$$

sajátérték-feladatát az alábbiak szerint fogalmazta át [7]. Keressük az $\hat{F}$ önadjungált operátorhoz tartozó $\hat{E}(f)$ projektorok olyan családját ($-\infty < \lambda < \infty$), amely a következő tulajdonságokkal rendelkezik:

- (S_1 .) $\hat{E}(f)|\psi\rangle \rightarrow |0\rangle$, ha $f \rightarrow -\infty$, és $\hat{E}(f)|\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle$, ha $f \rightarrow +\infty$ bármely $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ esetén; továbbá $\hat{E}(f)|\psi\rangle \rightarrow \hat{E}(f_0)|\psi\rangle$, ha $f \rightarrow f_0$ és $f \geq f_0$ minden $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ -ra, vagyis $\hat{E}(f)$ jobbról folytonos, mint f függvénye;
- (S_2 .) Ha $f' \leq f''$, akkor $\hat{E}(f') \leq \hat{E}(f'')$; vagyis, ha $\hat{E}(f) = \hat{P}_{\mathcal{M}_f}$ az $\mathcal{M}_f$ altérre (zárt lineáris sokaságra) vetít, akkor $\mathcal{M}_{f'} \subseteq \mathcal{M}_{f''}$;
- (S_3 .) Az

$$\mathcal{I} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f^2 d\left(\|\hat{E}(f)|\psi\rangle\|^2\right) \quad (\text{F.22})$$

integrál vagy konvergencia (és ez esetben zérus vagy véges pozitív értékű), vagy divergens ($+\infty$), és meghatározza $\hat{F}$ értelmezési tartományát. A $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ vektor akkor és csak akkor eleme a $D(\hat{F})$ értelmezési tartománynak, ha $\mathcal{I}$ konvergens, és ekkor $\|\hat{F}|\psi\rangle\|^2 = \mathcal{I}$, vagyis $\hat{F}|\psi\rangle$ is benne van a $\mathcal{H}$ Hilbert-térben. Ekkor $\forall |\psi\rangle, |\phi\rangle$ esetén fennáll, hogy

$$(\hat{F}\psi, \phi) = \int_{-\infty}^{\infty} f d\left(\hat{E}(f)\psi, \phi\right). \quad (\text{F.23})$$

Ez utóbbi egyenlőséget lehet formálisan az

$$\hat{F} = \int_{-\infty}^{\infty} f d\hat{E}(f) \quad (\text{F.24})$$

alakba is írni. Az (F.22) és az (F.23) egyenlőségek jobb oldalán Stieltjes-integrál szerepel, amelyet az alábbi integrálközelítő összeg minden határon túli finomításával definiálunk:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) dg(x) = \lim \sum_k f(x_k)[g(x_{k+1}) - g(x_k)], \quad (\text{F.25})$$

ahol $\lim$ utal a valós x -tengely $\dots, x_{k-1}, x_k, x_{k+1}, \dots$ felosztásának minden határon túl történő finomítására.

Az (S_1), (S_2), (S_3) feltételeknek eleget tevő projektorcsaládot az $\hat{F}$ önadjungált operátorhoz tartozó egységfelbontásnak nevezik.

A sajátérték-feladat általános megfogalmazása tehát az, hogy keressük az $\hat{F}$ önadjungált operátorhoz tartozó egységfelbontást [7]. Meg lehet mutatni, hogy véges

dimenziós Hilbert-tér esetén ez a feladat egyenértékű az (F.21) sajátégyenlet megoldásainak (a sajátvektorok, illetőleg sajátaltér és sajátértékek) megkeresésével. Általánosságban elmondható, hogy az (F.21) sajátérték-egyenletnek csak azon $f = f_i$ pontokban létezik $|\psi\rangle \neq |0\rangle$ megoldása, ahol $\hat{E}(f)$ -nek szakadása van. Az ilyen f_i pontokban $\hat{E}(f_i)$ egyúttal $\hat{E}(f)$ jobb oldali határértéke, vagyis $\hat{E}(f) \rightarrow \hat{E}(f_i)$, ha $f \rightarrow f_i$ és $f \geq f_i$. Továbbá a szakadási pontokban legyen $\hat{E}^{(1)}(f_i)$ az $\hat{E}(f)$ bal oldali határértéke, vagyis $\hat{E}(f) \rightarrow \hat{E}^{(1)}(f_i)$, ha $f \rightarrow f_i$ és $f < f_i$. Ekkor $\hat{E}^{(1)}(f_i) \leq \hat{E}(f_i)$, úgyhogy $\hat{E}(f_i) - \hat{E}^{(1)}(f_i) = \hat{P}_{\mathcal{H}_i}$ projektor, amely az f_i sajátértékhez tartozó sajátvektorok $\mathcal{H}_i$ alterére vetít. Ha $\mathcal{M}_i$ -vel és $\mathcal{M}_i^{(1)}$ -vel jelöljük rendre azokat az altérket, amelyekre $\hat{E}(f_i)$ és $\hat{E}^{(1)}(f_i)$ vetítenek, akkor $\mathcal{M}_i = \mathcal{M}_i^{(1)} \cup \mathcal{H}_i$. Az $\hat{E}(f)$ projektor $f = f_i$ szakadási helyei alkotják az $\hat{F}$ operátor diszkrét spektrumát. Legyen f_i és $f_j > f_i$ tetszőleges szakadási helyek, akkor a megfelelő $\mathcal{H}_i$ és $\mathcal{H}_j$ sajátaltérrek ortogonálisak, hiszen

$$\begin{aligned}\hat{P}_{\mathcal{H}_i} \hat{P}_{\mathcal{H}_j} &= [\hat{E}(f_i) - \hat{E}^{(1)}(f_i)][\hat{E}(f_j) - \hat{E}^{(1)}(f_j)] \\ &= \hat{E}(f_i)\hat{E}(f_j) - \hat{E}^{(1)}(f_i)\hat{E}(f_j) - \hat{E}(f_i)\hat{E}^{(1)}(f_j) + \hat{E}^{(1)}(f_i)\hat{E}^{(1)}(f_j) \\ &= \hat{E}(f_i) - \hat{E}^{(1)}(f_i) - \hat{E}(f_i) + \hat{E}^{(1)}(f_i) = \hat{0}.\end{aligned}\tag{F.26}$$

Ebből következik, hogy a diszkrét spektrumhoz tartozó $\mathcal{H}_i$ páronként ortogonális altérkből vett vektorokból akkor és csak akkor lehet teljes ortonormált rendszert szerkeszteni, ha $\mathcal{H} = \oplus_i \mathcal{H}_i$, vagyis az egész Hilbert-tér előáll a diszkrét spektrumhoz tartozó páronként ortogonális $\mathcal{H}_i$ altérrek direkt összegeként. Ez csak tisztán diszkrét spektrumú $\hat{F}$ operátor esetén lehet így. Ebben az esetben létezik az (F.21) sajátértékegyenlet megoldásainak $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots$ ortonormált teljes rendszere (rendre az $f_1, f_2, \dots$ sajátértékekkel) és a keresett projektorcsalád

$$\hat{E}(f) = \sum_{f_i \leq f} \hat{P}_{\mathcal{H}_i},\tag{F.27}$$

ahol $\mathcal{H}_i$ az f_i sajátértékhez tartozó sajátvektorok által kifeszített altér, és összegezni kell minden olyan altérre, amelyhez tartozó f_i sajátértékre $f_i \leq f$. Ez azt jelenti, hogy $\hat{E}(f)$ állandó az $[f_i, f_{i+1})$ intervallumokban, miközben az $f = f_i$ helyeken szakadása van.

Meg lehet mutatni, hogy ha van olyan $f' \leq f \leq f''$ véges intervallum, amelyben $\hat{E}(f)$ folytonosan nő, azaz $\hat{E}(f)$ folytonos ebben az intervallumban és $\hat{E}(f') \neq \hat{E}(f'')$, akkor nem létezik az (F.21) sajátértékegyenlet nem azonosan zérus megoldásaiból szerkeszthető ortonormált teljes rendszer [7]. Ekkor ugyanis be lehet látni, hogy $\hat{E}(f'') - \hat{E}(f') = \hat{P}_{\mathcal{N}}$ olyan altér projektora, amelyik nem azonos a tisztán nullvektort tartalmazó altérrel, $\mathcal{N} \neq \{|0\rangle\} = [|0\rangle]$, és $\mathcal{N}$ ortogonális valamennyi, a diszkrét spektrumhoz (szakadási helyekhez) tartozó $\mathcal{H}_i$ altérre. Nyilvánvaló, hogy ebben az esetben csak $\mathcal{H}_i$ -kből vett vektorokból nem lehet teljes ortonormált rendszert szerkeszteni.

Vizsgáljuk a továbbiakban a tisztán folytonos spektrum esetét. Legyen $\hat{F}$ tisztán folytonos spektrummal rendelkező önadjungált operátor, és tekintsük a Hilbert-teret az F -ábrázolásban, vagyis tekintsük a $\psi(F)$ négyzetesen integrálható függvények $L_2(\mathbb{R}, dF)$ Hilbert-terét. Az (F.21) sajátértékegyenlet

$$(F - f)\psi(F) = 0 \quad (\text{F.28})$$

alakot ölt. Ennek megoldása mindenütt $\psi(F) = 0$, kivéve az $F = f$ pontot, ami viszont nullmértékű halmaz, így a megoldás az azonosan nulla függvény $\psi(F) = 0$ (a Hilbert-tér nulleleme). Neumann gondolatmenetét követve, megsejthetjük, hogy mi az $\hat{F}$ operátorhoz tartozó egységfelbontás. Ha több olyan $F = f', f'', \dots, f^{(s)}$ sajátértéket is figyelembe vennénk, ahol $f' < f'' < \dots < f^{(s)} \leq f_0$, akkor az egyes sajátértékekhez tartozó megoldások lineáris kombinációja lenne megoldás. Ez folytonosan egymást követő pontok esetén olyan $\psi_{f \leq f_0}(F)$ függvény lenne, amelyre az igaz, hogy $\psi(F) \neq 0$, ha $F \leq f_0$ és $\psi(F) = 0$, ha $F > f_0$.

Az (F.28) egyenlet formális megoldása $\psi_f(F) = \delta(F - f)$. Az összes $f \leq f_0$ folytonos sajátértékhez tartozó megoldás a $\psi_f(F)$ formális megoldások valamilyen $c(f) \in \mathbb{C}$ amplitudókkal képezett lineáris kombinációja lenne:

$$\psi_{f \leq f_0}(F) = \int_{-\infty}^{f_0} df c(f) \psi_f(F) = \int_{-\infty}^{f_0} df c(f) \delta(F - f) = \begin{cases} c(F), & \text{ha } F \leq f_0 \\ 0 & \text{ha } F > f_0 \end{cases}. \quad (\text{F.29})$$

Diszkrét esetben az összes $f_i \leq f_0$ sajátértékhez tartozó sajátvektorok $\mathcal{M}_{f_0}$ alteret feszítik ki, amely azon $\mathcal{H}_i$ alterek direkt összege, amelyekhez tartozó $f_i \leq f_0$, és ekkor az egységfelbontást az (F.27) projektorcsalád jelenti. Folytonos spektrum esetén a $\psi_{f \leq f_0}(F)$ négyzetesen integrálható függvények is kifeszítik egy $\mathcal{N}_{f_0}$ alteret és az a sejtésünk, $\hat{E}(f_0) = \hat{P}_{\mathcal{N}_{f_0}}$ jelenti az egységfelbontást biztosító projektorcsaládot. Be lehet bizonyítani, hogy valóban teljesülnek ekkor az egységfelbontás S_1, S_2, S_3 követelményei [7]. Ekkor tetszőleges $\psi(F) \in L_2(\mathbb{R}, dF)$ esetén

$$\begin{aligned} \hat{E}(f_0)\psi(F) &= \begin{cases} \psi(F), & \text{ha } F \geq f_0 \\ 0, & \text{ha } F < f_0 \end{cases}, \text{ és} \\ [\hat{1} - \hat{E}(f_0)]\psi(F) &= \begin{cases} 0 & \text{ha } F \geq f_0 \\ \psi(F) & \text{ha } F < f_0 \end{cases}. \end{aligned} \quad (\text{F.30})$$

Fedjük le a valós számegyenes az $\{[f_i, f_i + \Delta f] | i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots\}$ diszjunkt intervallumok összességével, és képezzük az

$$\hat{E}_\Delta(f_i) = \hat{E}(f_i + \Delta f) - \hat{E}(f_i) \quad (\text{F.31})$$

projektorokat. Ezek tetszőleges $\psi(F) \in L_2(\mathbb{R}, dF)$ hullámfüggvényre úgy hatnak, hogy kivágják belőle az $[f_i, f_i + \Delta f]$ intervallumba eső részt:

$$\begin{aligned} \psi_i^\Delta(F) &\equiv \hat{E}_\Delta(f_i)\psi(F) = \begin{cases} \psi(F), & \text{ha } F \leq f_i + \Delta f \\ 0, & \text{ha } F > f_i + \Delta f \end{cases} - \begin{cases} \psi(F), & \text{ha } F \leq f_i \\ 0, & \text{ha } F > f_i \end{cases} \\ &= \begin{cases} \psi(F) - \psi(F) = 0, & \text{ha } F \leq f_i \\ \psi(F) - 0 = \psi(F), & \text{ha } f_i < F \leq f_i + \Delta f \\ 0 - 0 = 0, & \text{ha } F > f_i + \Delta f \end{cases}. \end{aligned} \quad (\text{F.32})$$

vagyis $\hat{F}^\Delta(f_i) = \hat{P}_{\mathcal{H}_i^\Delta}$ arra a $\mathcal{H}_i^\Delta$ altérre vetít, amelyre $\mathcal{H}_i^\Delta \oplus \mathcal{N}_{f_i} = \mathcal{N}_{f_i + \Delta f}$. A teljes Hilbert-tér az összes $\mathcal{H}_i^\Delta$ altér direkt összege: $\mathcal{H} = \oplus_i \mathcal{H}_i^\Delta$, és tetszőleges $\psi(F) \in L_2(\mathbb{R}, dF)$ előállítható, mint az egyes $[f_i, f_i + \Delta f)$ „ablakokban” vett darabjainak összege: $\psi(F) = \sum_i \psi_i^\Delta(F)$.

Az utóbbi állítás abból következik, hogy

$$\sum_{i=-N}^N \hat{F}^\Delta(f_i) = \sum_{i=-N}^N \left(\hat{E}(f_i + \Delta f) - \hat{E}(f_i) \right) = \hat{E}(f_N + \Delta f) - \hat{E}(f_{-N}) \quad (\text{F.33})$$

ahol $N \rightarrow \infty$ határesetben a jobb oldal $\hat{1} - \hat{0} = \hat{1}$, úgyhogy

$$\psi(F) = \hat{1}\psi(F) = \lim_{N \rightarrow \infty} \hat{F}_\Delta(f_i)\psi(F) = \sum_i \psi_i^\Delta(F). \quad (\text{F.34})$$

Érdemes a Neumann-féle egységfelbontás alapján kapott $\psi_i^\Delta(F)$ hullámfüggvényeket összevetni az $\hat{F}$ operátorhoz tartozó

$$\begin{aligned} \psi_{f_i, \Delta f}(F) &\equiv \langle F | f_i, f_i + \Delta f \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta f}} \int_{f_i}^{f_i + \Delta f} dF' \langle F | F' \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{\Delta f}} \int_{f_i}^{f_i + \Delta f} dF' \delta(F - F') \\ &= \frac{1}{\sqrt{\Delta f}} \begin{cases} 1, & \text{ha } f_i \leq F < f_i + \Delta f \\ 0, & \text{ha } F < f_i \text{ és } F \geq f_i + \Delta f \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{F.35})$$

sajátdifferenciálokkal. Ezek segítségével képezhetjük a

$$\phi(F) = \sum_i c_i \psi_{f_i, \Delta f}(F) \quad (\text{F.36})$$

függvényt, ahol az összegzés kiterjed a valós számegeyenest lefedő összes $[f_i, f_i + \Delta f)$ intervallumra és

$$c_i = \int_{-\infty}^{\infty} dF \psi_{f_i, \Delta f}(F) \psi(F) \quad (\text{F.37})$$

tetszőleges $\psi(F) \in L_2(\mathbb{R}, dF)$ mellett. Ekkor

$$c_i = \frac{1}{\sqrt{\Delta f}} \int_{f_i}^{f_i + \Delta f} dF \psi(F) \equiv \sqrt{\Delta f} \bar{\psi}^i, \quad (\text{F.38})$$

ahol $\bar{\psi}^i$ nem más, mint $\psi(F)$ -nek az i -edik intervallumon vett aritmetikai középértéke. A $\phi(F)$ sor tehát nem $\psi(F)$ -et állítja elő, hanem azt olyan lépcsős függvénnyel közelíti, amelynek konstans értékei az egyes intervallumokban a $\psi(F)$ -nek ezen intervallumokban vett középértékei:

$$\begin{aligned} \phi(F) &= \sum_i \sqrt{\Delta f} \bar{\psi}^i \frac{1}{\sqrt{\Delta f}} \Theta(f_i + \Delta f - F) \Theta(F - f_i) \\ &= \sum_i \Theta(f_i + \Delta f - F) \Theta(F - f_i) \bar{\psi}^i. \end{aligned} \quad (\text{F.39})$$

Ugyanezt láttuk az (F.20) sor vizsgálata során. Ha most Δf -fel nullához tartunk, akkor a $\phi(F)$ lépcsős függvény konvergálni fog az eredeti $\psi(F)$ hullámfüggvényhez.

F.3. A koordináta- és az impulzus-operátorhoz tartozó saját-differenciálok koordináta-reprezentációban

A q koordináta és a hozzá kanonikusan konjugált p impulzus folytonos spektrumú mennyiségek. (Az utóbbi csak akkor, ha q nincsen véges intervallumra vagy a félegyenesre korlátozva.) A nem valódi sajátvektorok a $|q\rangle$ és a $|p\rangle$ vektorok, koordináta- és az impulzus-ábrázolásban a $|\psi\rangle$ állapot hullámfüggvénye $\psi(q) = \langle q|\psi\rangle$ és $\psi(p) = \langle p|\psi\rangle$. A velük történő számolás megfelelő konvencióival már találkoztunk. Koordináta-reprezentációban a koordináta-operátor Weyl-féle saját-differenciálja:

$$\begin{aligned}\psi_{q,\Delta q}(q') &= \langle q'|q, \Delta q\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta q}} \int_q^{q+\Delta q} dq'' \langle q'|q''\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{\Delta q}} \Theta(q' - q) \Theta(q + \Delta q - q').\end{aligned}\quad (\text{F.40})$$

Ez olyan függvény, amely a $[q, q + \Delta q]$ intervallumban a konstans $1/\sqrt{\Delta q}$ értéket veszi fel, mindenütt máshol az értéke zérus. Közvetlenül is ellenőrizhetjük, hogy ez 1-re normált hullámfüggvény,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq' |\psi_{q,\Delta q}(q')|^2 = \frac{1}{\Delta q} \int_q^{q+\Delta q} dq' = \frac{\Delta q}{\Delta q} = 1. \quad (\text{F.41})$$

Nyilvánvaló, hogy az (F.7) kapcsolat értelmében a q koordináta-sajátértékhez tartozó, koordináta-reprezentációbeli $\psi_q(q')$ hullámfüggvényre fennáll, hogy

$$\psi_q(q') = \lim_{\Delta q \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\Delta q}} \psi_{q,\Delta q}(q') \quad (\text{F.42})$$

hiszen

$$\lim_{\Delta q \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta q} \Theta(q' - q) \Theta(q + \Delta q - q') \quad (\text{F.43})$$

azonosítható a $\delta(q - q')$ Dirac-deltával.

Tetszőleges $\psi(q) \in L_2$ hullámfüggvény esetén

$$\begin{aligned}& \int_{-\infty}^{\infty} dq' \lim_{\Delta q \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta q} \Theta(q' - q) \Theta(q + \Delta q - q') \psi(q') \\ &= \lim_{\Delta q \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta q} \int_q^{q+\Delta q} dq' \psi(q') \\ &= \psi(q) \lim_{\Delta q \rightarrow 0} \frac{\Delta q}{\Delta q} = \psi(q) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(q - q') \psi(q').\end{aligned}\quad (\text{F.44})$$

A $\hat{p}$ impulzus-operátor Weyl-féle saját differenciálja koordináta-reprezentációban:

$$\psi_{p,\Delta p}(q) = \langle q|p, \Delta p \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta p}} \int_p^{p+\Delta p} dp' \langle q|p' \rangle \quad (\text{F.45})$$

Most megmutatjuk, hogy ha az egymáshoz kanonikusan konjugált q és p változópár esetén a megfelelő nem valódi sajátvektorok skaláris szorzatát

$$\langle q|p \rangle = e^{ipq} \quad (\text{F.46})$$

módon definiáljuk, akkor visszkapjuk az impulzus-operátor p sajátértékhez tartozó koordináta-reprezentációban érvényes $\psi_p(q) = e^{ipq}$ nem valódi sajátfüggvényét, ami természetesen nem eleme az $L_2(\mathbb{R}, dp)$ Hilbert-térnek.

Az (F.46) skalárszorzatot felhasználva írhatjuk, hogy

$$\psi_{p,\Delta p}(q) = \frac{1}{\sqrt{\Delta p}} \int_p^{p+\Delta p} dp' e^{ip'q} = \frac{1}{iq\sqrt{\Delta p}} \left(e^{i(p+\Delta p)q} - e^{ipq} \right). \quad (\text{F.47})$$

Ebből az (F.7) összefüggés értelmében azt kapjuk, hogy

$$\psi_p(q) = \lim_{\Delta p \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\Delta p}} \psi_{p,\Delta p}(q) = \lim_{\Delta p \rightarrow 0} \frac{1}{iq\Delta p} e^{ipq} (1 + iq\Delta p - 1) = e^{ipq}. \quad (\text{F.48})$$

Visszakaptuk tehát a $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \psi_p(q) = p\psi_p(q)$ sajátérték-egyenlet formális megoldását.

G. A harmonikus oszcillátor koherens állapotai[8, 9]

G.1. Az időtől független koherens állapotok

A koherens állapotok olyan állapotok, amelyek telítésbe viszik a Heisenberg-féle határozatlansági relációt.

Legyenek $\hat{x}$ és $\hat{p}_x$ a lineáris oszcillátorhoz tartozó koordináta- és impulzus-operátorok, és

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{x} - i\hat{p}_x), \quad \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{x} + i\hat{p}_x) \quad (\text{G.1})$$

a megfelelő keltő és eltüntető operátorok. Alább jól hasznosítjuk majd a megfelelő imverz-kapcsolatokat:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{p}_x = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger). \quad (\text{G.2})$$

A harmonikus oszcillátor koherens állapotai az $\hat{a}$ eltüntető operátor $\alpha \in \mathbb{C}$ komplex sajátértékekhez tartozó $|\alpha\rangle$ sajátállapotai, amelyek valódi állapotvektorok, a Hilbert-tér elemei:

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad \langle\alpha|\alpha\rangle = 1. \quad (\text{G.3})$$

Ténylegesen belátható, hogy ezek az állapotok telítésbe viszik a Heisenberg-féle határozatlansági relációt,

$$(\Delta x)^2(\Delta p_x)^2 = \frac{\hbar^2}{4}. \quad (\text{G.4})$$

Képezzük az alábbi várható értékeket:

$$\langle\alpha|\hat{x}|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle\alpha|\hat{a} + \hat{a}^\dagger|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\alpha + \alpha^*), \quad (\text{G.5})$$

$$\langle\alpha|\hat{p}_x|\alpha\rangle = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\langle\alpha|\hat{a} - \hat{a}^\dagger|\alpha\rangle = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\alpha - \alpha^*), \quad (\text{G.6})$$

$$\begin{aligned} \langle\alpha|\hat{x}^2|\alpha\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle\alpha|(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2|\alpha\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\langle\alpha|\hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \underbrace{\hat{a}\hat{a}^\dagger}_{\hat{a}^\dagger\hat{a}+1} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\left((\alpha + \alpha^*)^2 + 1\right), \end{aligned} \quad (\text{G.7})$$

$$\begin{aligned} \langle\alpha|\hat{p}_x^2|\alpha\rangle &= -\frac{m\hbar\omega}{2}\langle\alpha|(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2|\alpha\rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2}\langle\alpha|\hat{a}^2 - \hat{a}^\dagger\hat{a} - \underbrace{\hat{a}\hat{a}^\dagger}_{\hat{a}^\dagger\hat{a}+1} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle \\ &= -\frac{m\hbar\omega}{2}\left((\alpha - \alpha^*)^2 - 1\right) \end{aligned} \quad (\text{G.8})$$

és

$$(\Delta x)^2 = \langle\alpha|\hat{x}^2|\alpha\rangle - \langle\alpha|\hat{x}|\alpha\rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\left((\alpha + \alpha^*)^2 + 1 - (\alpha + \alpha^*)^2\right) = \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad (\text{G.9})$$

$$(\Delta p_x)^2 = \langle\alpha|\hat{p}_x^2|\alpha\rangle - \langle\alpha|\hat{p}_x|\alpha\rangle^2 = -\frac{m\hbar\omega}{2}\left((\alpha - \alpha^*)^2 - 1 - (\alpha - \alpha^*)^2\right) = \frac{m\hbar\omega}{2}. \quad (\text{G.10})$$

Az utóbbi szórásnégyzetek szorzata:

$$(\Delta x)^2(\Delta p_x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \frac{m\hbar\omega}{2} = \frac{\hbar^2}{4}. \quad (\text{G.11})$$

A koherens állapotok előállíthatók, mint megszámlálhatóan végtelen sok $|n\rangle$ energia-sajátállapot lineáris szuperpozíciója:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (\text{G.12})$$

A tény önmagában triviális, hiszen a harmonikus oszcillátor energia-sajátállapotai ortonormált teljes rendszert alkotnak, a kifejtési együtthatók meghatározása azonban némi körütekintést igényel.

Mivel az

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^{\dagger n} |0\rangle, \quad \langle n|m\rangle = \delta_{n,m} \quad (\text{G.13})$$

energia-sajátállapotok ortonormált teljes rendszert alkotnak, írhatjuk, hogy

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle, \quad (\text{G.14})$$

ahol

$$c_n = \langle n|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle 0|\hat{a}^n|\alpha\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle 0|\alpha\rangle, \quad (\text{G.15})$$

vagyis

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle n|\alpha\rangle |n\rangle = \langle 0|\alpha\rangle \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (\text{G.16})$$

A koherens állapotok normálási feltételéből meg tudjuk határozni a $|0\rangle$ alapállapot és az $|\alpha\rangle$ koherens állapot fedési integrálját:

$$\begin{aligned} 1 &= \langle \alpha|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \alpha|n\rangle \langle n|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \langle \alpha|\hat{a}^{\dagger n}|0\rangle \langle 0|\hat{a}^n|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} |\langle 0|\alpha\rangle|^2 \\ &= e^{|\alpha|^2} |\langle 0|\alpha\rangle|^2. \end{aligned} \quad (\text{G.17})$$

Innen az egységnyi abszolút értékű komplex fázisfaktort (az általánosság csorbulása nélkül) 1-nek választva kapjuk, hogy

$$\langle 0|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}. \quad (\text{G.18})$$

Ha ezt belyettesítjük az (G.16) egyenlőség jobb oldalába, akkor megkapjuk a koherens állapot keresett (G.12) kifejtését az energia-sajátállapotok szerinti sorba.

Mintegy ellenőrzésképpen meggyőződhetünk róla, hogy az (G.12) sorral előállított koherens állapot valóban 1-re van normálva.

$$\langle \alpha|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2} \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{n!}} \langle n|m\rangle \frac{\alpha^m}{\sqrt{m!}} = e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = e^{-|\alpha|^2} e^{|\alpha|^2} = 1. \quad (\text{G.19})$$

A koherens állapotok tömör alakban előállíthatók a harmonikus oszcillátor $|0\rangle$ alapállapotából a fáziseltolás $\hat{D}(\alpha)$ operátora segítségével,

$$|\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha)|0\rangle, \quad \text{ahol} \quad \hat{D}(\alpha) \equiv \exp\left(\alpha\hat{a}^{\dagger} - \alpha^*\hat{a}\right). \quad (\text{G.20})$$

(Az operátor elnevezése az optikai alkalmazásokból származik.)

Induljunk ki a koherens állapot (G.12) alakjából és írjuk bele az energia-sajátállapotokat $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^{\dagger n} |0\rangle$ alakban,

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha\hat{a}^{\dagger})^n}{n!} |0\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha\hat{a}^{\dagger}} |0\rangle. \quad (\text{G.21})$$

Ezt követően szükségünk van a Baker-Campbell-Hausdorff-képletre: ha $\hat{X}$, $\hat{Y}$ olyan operátorok, hogy felcserélhetők az $[\hat{X}, \hat{Y}]$ kommutátorukkal, azaz

$$\text{ha } [\hat{X}, [\hat{X}, \hat{Y}]], [\hat{Y}, [\hat{X}, \hat{Y}]], \text{ akkor } e^{\hat{X}+\hat{Y}} = e^{-\frac{1}{2}[\hat{X}, \hat{Y}]} e^{\hat{X}} e^{\hat{Y}}. \quad (\text{G.22})$$

Legyen most $\hat{X} = \alpha \hat{a}^\dagger$, $\hat{Y} = -\alpha^* \hat{a}$, amikor is

$$[\hat{X}, \hat{Y}] = [\alpha \hat{a}^\dagger, -\alpha^* \hat{a}] = -|\alpha|^2 (\hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^\dagger) = |\alpha|^2, \quad (\text{G.23})$$

úgyhogy teljesülnek az (G.22) képlet alkalmazásának feltételei, és azt kapjuk a segítségével, hogy

$$e^{\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}} = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha \hat{a}^\dagger} e^{-\alpha^* \hat{a}}. \quad (\text{G.24})$$

Írhatjuk tehát, hogy

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha \hat{a}^\dagger} |0\rangle = e^{\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}} e^{\alpha^* \hat{a}} |0\rangle = e^{\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}} |0\rangle, \quad (\text{G.25})$$

ahol felhasználtuk, hogy az alapállapot $\hat{a}|0\rangle = 0$ definícióját, aminek következtében $e^{\alpha^* \hat{a}} |0\rangle = |0\rangle$.

Könnyen meggyőződhetünk róla, hogy a koherens állapotok nem ortogonálisak; az $|\alpha\rangle$ és a $|\beta\rangle$ állapotok átfedési valószínűsége:

$$|\langle\alpha|\beta\rangle|^2 = e^{-|\alpha-\beta|^2}. \quad (\text{G.26})$$

A bizonyításhoz megint a koherens állapot (G.12) alakjából indulunk ki,

$$\begin{aligned} \langle\alpha|\beta\rangle &= e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2)} \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{n!}} \frac{\beta^m}{\sqrt{m!}} \underbrace{\langle n|m\rangle}_{=\delta_{n,m}} \\ &= e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha^* \beta)^n}{n!} = e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2)+\alpha^* \beta} e^{-\frac{1}{2}(\alpha^* \alpha + \beta^* \beta - 2\alpha^* \beta)}. \end{aligned} \quad (\text{G.27})$$

Képezzük ezen átmeneti amplitudó abszolút értékének a négyzetét:

$$\begin{aligned} |\langle\alpha|\beta\rangle|^2 &= \langle\alpha|\beta\rangle \langle\beta|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}(\alpha^* \alpha + \beta^* \beta - 2\alpha^* \beta)} e^{-\frac{1}{2}(\alpha^* \alpha + \beta^* \beta - 2\alpha \beta^*)} \\ &= e^{-\frac{1}{2}(2|\alpha|^2+2|\beta|^2-2\alpha^* \beta-2\alpha \beta^*)} = e^{-(\alpha-\beta)(\alpha-\beta)^*} = e^{-|\alpha-\beta|^2}. \end{aligned} \quad (\text{G.28})$$

Azt mondhatjuk tehát, hogy az $|\alpha\rangle$ koherens állapotok túlteljes rendszert alkotnak, mert bármely koherens állapotban véges amplitudóval megtalálható bármely másik koherens állapot. Ennek ellenére létezik a koherens állapotok szerinti egységfelbontás:

$$\frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} d^2\alpha |\alpha\rangle \langle\alpha| = \hat{1}, \quad (\text{G.29})$$

ahol a komplex síkra történik az integrálás: legyen $\alpha = r e^{i\varphi}$, ahol $r \in [0, \infty)$ és $\varphi \in [0, 2\pi)$, akkor $d^2\alpha = r dr d\varphi$ és

$$\int_{\mathbb{C}} d^2\alpha \dots = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r dr \dots \quad (\text{G.30})$$

Megint a koherens állapot (G.12) alakjából indulunk ki,

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{C}} d^2\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| &= \int_{\mathbb{C}} d^2\alpha e^{-|\alpha|^2} \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{\alpha^{*n}\alpha^m}{\sqrt{n!m!}} |m\rangle\langle n| \\
&= \sum_{n,m=0}^{\infty} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m-n)\varphi} \int_0^{\infty} r dr e^{-r^2} \frac{r^{m+n}}{\sqrt{n!m!}} |m\rangle\langle n| \\
&= \sum_{n,m=0}^{\infty} 2\pi \delta_{m,n} \int_0^{\infty} r dr e^{-r^2} \frac{r^{m+n}}{\sqrt{n!m!}} |m\rangle\langle n| \\
&= 2\pi \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|n\rangle\langle n|}{n!} \int_0^{\infty} dr r^{2n+1} e^{-r^2}, \tag{G.31}
\end{aligned}$$

ahol felhasználtuk, hogy

$$\int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m-n)\varphi} = \begin{cases} 0, & \text{ha } m \neq n \\ 2\pi & \text{ha } m = n \end{cases}. \tag{G.32}$$

Az r szerinti integrálban áttérünk az $s = r^2$ integrálási változóra, ekkor $ds = 2r dr$ és a Γ függvény integrál-előállítását kapjuk:

$$\int_0^{\infty} dr r^{2n+1} e^{-r^2} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} ds s^n e^{-s} = \frac{1}{2} \Gamma(n+1) = \frac{1}{2} n!. \tag{G.33}$$

Ha mindezt behelyettesítjük az (G.29) egyenlőség bal oldalába, akkor megkapjuk a jobb oldali egységoperátort $\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|$ alakban.

A koherens állapotok további jellegzetessége, hogy benne az energiakvantumok száma Poisson-eloszlást mutat [9]: vagyis annak a valószínűsége, hogy az $|\alpha\rangle$ koherens állapotban n darab $\hbar\omega$ kvantum van jelen,

$$|\langle n|\alpha\rangle|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2}. \tag{G.34}$$

Ebből következik, hogy a $\hbar\omega$ kvantumok számának várható értéke megegyezik a Poisson-eloszlás $|\alpha|^2$ paraméterével:

$$\bar{n} \equiv \langle \alpha | \hat{n} | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \alpha \rangle = |\alpha|^2. \tag{G.35}$$

Ezt az eredményt azonnal megkapjuk, ha az (G.12) kifejezést beírjuk a keresett egyenlőség bal oldalába és felhasználjuk a stacionárius állapotok ortonormáltságát.

G.2. A koherens állapotok időfüggése

Érdemes még megvizsgálni a koherens állapotok időfüggését. Azt fogjuk belátni, hogy a koherens állapotban az x koordináta és a p_x impulzus várható értéke a klasszikus mechanikai oszcillátor koordinátájához és impulzusához hasonlóan ω körfrekvenciával periódikus rezgéseket végez, miközben teljesíti a $\overline{p_x} = m\dot{\overline{x}}$ klasszikus

összefüggést. Az x koordináta várható értéke harmonikus rezgésének amplitudója $|\alpha|\sqrt{2\hbar m\omega}$ arányos a koherens állapot α paraméterének abszolút értékével. Belátjuk, hogy a koherens állapot az időbeli fejlődése során megőrzi a koherenciáját, ami az egyik legfontosabb tulajdonsága a koherens állapotnak.

A koherens állapot időfüggését könnyen megkaphatjuk, ha az (G.12) kifejezést a $t = 0$ pillanatban vett állapotnak tekintjük, és hattatjuk rá az $\hat{U}(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ evolúciós operátort, majd figyelembe vesszük, hogy

$$\hat{U}(t, 0)|n\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle = e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t}|n\rangle. \quad (\text{G.36})$$

Ekkor azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle_t &= \hat{U}(t, 0)|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} |n\rangle \\ &= e^{-i\frac{1}{2}\omega t} |\alpha e^{-i\omega t}\rangle = e^{-i\frac{1}{2}\omega t} |r e^{-i(\omega t - \varphi)}\rangle \end{aligned} \quad (\text{G.37})$$

Korábbi eredményeinket felhasználva kapjuk ezért, hogy

$$\begin{aligned} {}_t\langle\alpha|\hat{x}|\alpha\rangle_t &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(r e^{-i(\omega t - \varphi)} + r e^{i(\omega t - \varphi)} \right) \\ &= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} r \cos(\omega t - \varphi) \equiv \bar{x}(t), \end{aligned} \quad (\text{G.38})$$

$$\begin{aligned} {}_t\langle\alpha|\hat{p}_x|\alpha\rangle_t &= \frac{1}{i} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left(r e^{-i(\omega t - \varphi)} - r e^{i(\omega t - \varphi)} \right) \\ &= -\sqrt{2m\hbar\omega} r \sin(\omega t - \varphi) \equiv \overline{p_x}(t). \end{aligned} \quad (\text{G.39})$$

Innen következik, hogy koherens állapotban az $\bar{x}(t)$ és a $\overline{p_x}(t)$ várható értékek klasszikus viselkedést mutatnak, hiszen teljesen rájuk, hogy

$$\overline{p_x} = m\dot{\bar{x}}. \quad (\text{G.40})$$

Legyen $\alpha(t) = r e^{-i(\omega t - \varphi)}$, akkor $|\alpha\rangle_t = e^{-i\frac{1}{2}\omega t} |\alpha(t)\rangle$, és azt találjuk, hogy

$${}_t\langle\alpha|\hat{x}^2|\alpha\rangle_t = \langle\alpha(t)|\hat{x}^2|\alpha(t)\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \left(4(\text{Re}\alpha(t))^2 + 1 \right), \quad (\text{G.41})$$

$${}_t\langle\alpha|\hat{p}_x^2|\alpha\rangle_t = \langle\alpha(t)|\hat{p}_x^2|\alpha(t)\rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2} \left(-4(\text{Im}\alpha(t))^2 - 1 \right), \quad (\text{G.42})$$

amiket felhasználva a szórásnégyzetekre azt kapjuk, hogy

$$(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \left(4(\text{Re}\alpha(t))^2 + 1 - 4(\text{Re}\alpha(t))^2 \right) = \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad (\text{G.43})$$

$$(\Delta p_x)^2 = \frac{m\hbar\omega}{2} \left(4(\text{Im}\alpha(t))^2 + 14(\text{Im}\alpha(t))^2 \right) = \frac{m\hbar\omega}{2}. \quad (\text{G.44})$$

Következésképpen koherens állapotban tetszőleges t időpillanatban fennáll, hogy

$$(\Delta x)^2 (\Delta p_x)^2 = \frac{\hbar^2}{4}. \quad (\text{G.45})$$

A koherens állapot tehát az időbeli fejlődése során megőrzi a koherenciáját.

Végül megmutatjuk, hogy az $|\alpha\rangle_t = e^{-\frac{1}{2}i\omega t}|\alpha(t)\rangle$ koherens állapot $\psi_\alpha(x, t) = e^{-\frac{1}{2}i\omega t}\langle x|\alpha(t)\rangle$ koordináta-hullámfüggvénye az alábbi Gauss-alakú hullámcsomag [10]:

$$\psi_\alpha(x, t) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x - \bar{x}(t))^2 - i\left[\frac{1}{2}\omega t - \frac{\omega\bar{p}_x(t)}{\hbar}\left(x - \frac{1}{2}\bar{x}(t)\right)\right]\right\}. \quad (\text{G.46})$$

Ez Gauss-függvény alakú hullámcsomag, amelynek „csúcsa” az $\bar{x}(t)$ helyen van, azaz úgy mozog, ahogyan a klasszikus oszcillátor oszcillál $\sqrt{2}x_0r = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}|\alpha|$ amplitúdóval, és közben a hullámcsomag szélességét meghatározó $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ paraméter változatlan marad. A koherens állapotnak megfelelő hullámcsomag tehát lényegében úgy viselkedik, mint egy $\sim x_0$ méretű, $\bar{p}_x$ impulzusú klasszikus részecske.

Legyen most is $\alpha = re^{i\varphi}$ és akkor $\alpha(t) = re^{-i(\omega t - \varphi)}$, ahol $r \in \mathbb{R}$ és $\varphi \in [0, 2\pi)$. Felhasználva az (G.21) egyenlőséget, írhatjuk, hogy

$$\langle x|\alpha(t)\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha(t)|^2} e^{\alpha(t)\hat{a}^\dagger} \psi_0(x), \quad (\text{G.47})$$

ahol

$$\psi_0(x) = (\sqrt{\pi}x_0)^{-1/2} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (\text{G.48})$$

az oszcillátor alapállapotának hullámfüggvénye és

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{x_0} - x_0\frac{d}{dx}\right) \quad (\text{G.49})$$

a keltő operátor koordináta-reprezentációban. Fejtsük az exponenciális operátort Taylor-sorba,

$$\begin{aligned} e^{\alpha(t)\hat{a}^\dagger} \psi_0(x) &= (\sqrt{\pi}x_0)^{-1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[\alpha(t)]^n}{n!(\sqrt{2})^n} \left(\frac{x}{x_0} - x_0\frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} \\ &= (\sqrt{\pi}x_0)^{-1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[\alpha(t)]^n}{n!(\sqrt{2})^n} \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2}, \end{aligned} \quad (\text{G.50})$$

ahol $\xi = x/x_0$. Írjuk $e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ helyett, hogy $e^{\frac{1}{2}\xi^2}e^{-\xi^2}$, szorozzuk a jobb oldalon álló kifejezést balról $1 = e^{\frac{1}{2}\xi^2}e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ -tel, és ezután használjuk fel az

$$e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{\frac{1}{2}\xi^2} = (-1)^n \frac{d^n}{d\xi^n} \quad (\text{G.51})$$

operátor-azonosságot. Ekkor azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} e^{\alpha(t)\hat{a}^\dagger}\psi_0(x) &= (\sqrt{\pi}x_0)^{-1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[\alpha(t)]^n}{n!(\sqrt{2})^n} e^{\frac{1}{2}\xi^2} (-1)^n \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \\ &= (\sqrt{\pi}x_0)^{-1/2} e^{\frac{1}{2}\xi^2} \exp\left\{-\frac{\alpha(t)}{\sqrt{2}} \frac{d}{d\xi}\right\} e^{-\xi^2}, \end{aligned} \quad (\text{G.52})$$

ahol újra felösszegeztük a Taylor-sort. Most az $e^{-\xi^2}$ függvényre $e^{-b\frac{d}{d\xi}}$ alakú operátor hat. Tetszőleges $f(\xi)$ függvényre hatva ez az operátor az x változó eltolását jelenti,

$$e^{-b\frac{d}{d\xi}}f(\xi) = f(\xi - b) \quad (\text{G.53})$$

(Gondoljunk vissza arra, amikor az impulzus-operátorban felismertük a párhuzamos eltolás generátorát.) Azt kapjuk tehát, hogy

$$\begin{aligned} e^{-\frac{1}{2}|\alpha(t)|^2} e^{\alpha(t)\hat{a}^\dagger}\psi_0(x) &= (\sqrt{\pi}x_0)^{-1/2} e^{-\frac{1}{2}|\alpha(t)|^2 + \frac{1}{2}\xi^2} \exp\left\{-\left[\xi - \frac{\alpha(t)}{\sqrt{2}}\right]^2\right\} \\ &= e^Q. \end{aligned} \quad (\text{G.54})$$

Ha az exponenciális faktorokat összeszorozzuk, akkor a közös kitevő az alábbi alakot ölti:

$$\begin{aligned} Q &= -\frac{1}{2}|\alpha(t)|^2 + \frac{1}{2}\xi^2 - \left[\xi - \frac{\alpha(t)}{\sqrt{2}}\right]^2 \\ &= -\frac{1}{2}|\alpha(t)|^2 - \frac{1}{2}\xi^2 + 2\xi\frac{\alpha(t)}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2}\alpha^2(t) \\ &= -\frac{1}{2}\alpha_R^2(t) - \frac{1}{2}\alpha_I^2(t) - \frac{1}{2}\xi^2 + 2\xi\frac{\alpha_R(t)}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2}\alpha_R^2(t) + \frac{1}{2}\alpha_I^2(t) \\ &\quad + i\left(2\xi\frac{\alpha_I(t)}{\sqrt{2}} - \alpha_R(t)\alpha_I(t)\right) \\ &= -\frac{1}{2}\xi^2 + 2\xi\frac{\alpha_R(t)}{\sqrt{2}} - \alpha_R^2(t) + i\left(2\xi\frac{\alpha_I(t)}{\sqrt{2}} - \alpha_R(t)\alpha_I(t)\right) \\ &= -\left(\frac{\xi}{\sqrt{2}} - \alpha_R(t)\right)^2 + i\left(2\xi\frac{\alpha_I(t)}{\sqrt{2}} - \alpha_R(t)\alpha_I(t)\right), \end{aligned} \quad (\text{G.55})$$

ahol

$$\alpha_R(t) = \text{Re}\alpha(t) = r \cos(\omega t - \varphi), \quad \alpha_I(t) = \text{Im}\alpha(t) = -r \sin(\omega t - \varphi). \quad (\text{G.56})$$

Mivel

$$\bar{x}(t) = \sqrt{2}x_0 r \cos(\omega t - \varphi), \quad \overline{p_x}(t) = -\sqrt{2}m x_0 r \sin(\omega t - \varphi), \quad (\text{G.57})$$

írhatjuk, hogy

$$r \cos(\omega t - \varphi) = \frac{\bar{x}}{\sqrt{2}x_0}, \quad r \sin(\omega t - \varphi) = -\frac{\overline{p_x}}{m\sqrt{2}x_0}, \quad (\text{G.58})$$

és a közös kitevő az alábbi alakot ölti:

$$Q = -\frac{(x - \bar{x})^2}{2x_0^2} + i\left(\frac{\overline{p_x}x}{mx_0^2} - \frac{1}{2}\frac{\overline{p_x}\bar{x}}{mx_0^2}\right) = -\frac{(x - \bar{x})^2}{2x_0^2} + i\frac{\overline{p_x}}{mx_0^2}\left(x - \frac{1}{2}\bar{x}\right). \quad (\text{G.59})$$

Végül ezért azt találjuk, hogy a koherens állapot koordináta-hullámfüggvénye:

$$\begin{aligned}
\psi_\alpha(x, t) &= \langle x | \alpha \rangle_t = e^{-i\frac{1}{2}\omega t} \langle x | \alpha(t) \rangle = e^{-i\frac{1}{2}\omega t - \frac{1}{2}|\alpha(t)|^2} e^{\alpha(t)\hat{a}^\dagger} \psi_0(x) \\
&= (\sqrt{\pi}x_0)^{-1/2} \exp\left\{-\frac{(x-\bar{x})^2}{2x_0^2} - i\left[\frac{1}{2}\omega t - \frac{\bar{p}_x}{mx_0^2}\left(x - \frac{1}{2}\bar{x}\right)\right]\right\} \\
&= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-\bar{x})^2 - i\left[\frac{1}{2}\omega t - \frac{\omega\bar{p}_x}{\hbar}\left(x - \frac{1}{2}\bar{x}\right)\right]\right\} \quad (\text{G.60})
\end{aligned}$$

H. A hélium-atom

A hélium-atom atommagja 2 darab protont és 2 darab neutron tartalmaz, rendszáma $Z = 2$, elektromos töltése $2|e|$. A He-atom elektromosan semleges, 2 darab elektront tartalmaz kötött állapotban. Ezekre az atommag vonzó Coulomb-erőt gyakorol, a 2 elektron között pedig taszító Coulomb-erő lép fel. A két-elektronos rendszer Hamilton-operátora (az atommaghoz rögzített vonatkoztatási rendszerben):

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}, \quad (\text{H.1})$$

ahol

$$\hat{H}_0 = \hat{H}(1) + \hat{H}(2) \quad (\text{H.2})$$

a $\hat{H}(a)$ ($a = 1, 2$) egy-részecskés Hamilton-operátorokon keresztül tartalmazza az egyes elektronok kinetikus energiájának operátorát és az egyes elektronoknak a potenciális energiáját az atommag Coulomb-terében:

$$\hat{H}(a) = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_a - \frac{2e^2}{r_a}; \quad (\text{H.3})$$

itt $\vec{r}_a$ az atommagból (origóból) az egyes elektronokhoz mutató helyzetvektor, $\Delta_a = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_{ai}^2}$ az $\vec{r}_a$ vektor Descartes-koordinátáiból képezett Laplace-operátor. Az (elektron-elektron)-kölsönhatást a

$$\hat{W} = +\frac{e^2}{r_{12}} \quad (\text{H.4})$$

operátor veszi figyelembe, ahol $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ a 2 elektron távolsága. A He-atom stacionárius állapotainak meghatározása a

$$\hat{H}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{H.5})$$

időtől független Schrödinger-egyenlet megoldását igényli. Tegyük ezt most úgy, hogy feltesszük, hogy az elektronok a köztük levő taszító Coulomb-kölsönhatás miatt átlagosan elég távol vannak egymástól, úgyhogy a köztük lévő taszításból származó

energia kicsi az egyes elektronok kinetikus energiájához és az atommag terében felvett potenciális energiájához képest. Következésképpen a $\hat{W}$ kölcsönhatást perturbációnak tekinthetjük.

Abból indulunk ki, hogy a $\hat{H}(a)$ egy-részecskés Hamilton-operátorok sajátértékei és sajátfüggvényei ismertek. Ezt joggal mondhatjuk, hiszen ezek H-atomszerű egy-részecskés állapotok: 1s, 2s, 2p, stb. A feladat megoldását szűkítsük le arra, hogy **adott elektron-konfiguráció** vizsgálatára szorítkozunk. Tegyük tehát fel, hogy az egyes elektronok azokat a $\varphi_r(\vec{r})$ és $\varphi_s(\vec{r})$ egy-részecskés koordináta-hullámfüggvénnyel leírt állapotokat töltik be, amelyeknek a kvantumszámait az r és az s index jelöli, azaz

$$\hat{H}(a)\varphi_r(\vec{r}_a) = \varepsilon_r\varphi_r(\vec{r}_a) \quad \text{és} \quad \hat{H}(a)\varphi_s(\vec{r}_a) = \varepsilon_s\varphi_s(\vec{r}_a). \quad (\text{H.6})$$

Ekkor a perturbálatlan két-részecskés $\hat{H}_0$ Hamilton-operátor $\varepsilon_{r,s} = \varepsilon_r + \varepsilon_s$ energiasajátértéke 2-szeresen elfajult. Ez annak a következménye, hogy a

$$\phi_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_r(\vec{r}_1)\varphi_s(\vec{r}_2) \quad \text{és} \quad \phi_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_r(\vec{r}_2)\varphi_s(\vec{r}_1) \quad (\text{H.7})$$

perturbálatlan két-részecskés koordináta-hullámfüggvények ugyanahhoz az $\varepsilon_{r,s}$ energiaszinthez tartoznak és ortogonálisak, vagyis

$$\hat{H}_0\phi_1 = \varepsilon_{r,s}\phi_1 \quad \text{és} \quad \hat{H}_0\phi_2 = \varepsilon_{r,s}\phi_2, \quad (\text{H.8})$$

továbbá $\langle\phi_1|\phi_2\rangle = 0$ (ha $r \neq s$) és $\langle\phi_1|\phi_1\rangle = \langle\phi_2|\phi_2\rangle$, ha $\varphi_r(\vec{r})$ és $\varphi_s(\vec{r})$ ortonormált egy-részecskés koordináta-hullámfüggvények. Ez azt jelenti, hogy a perturbálatlan rendszer $\varepsilon_{r,s}$ energiaszintje 2-szeresen degenerált. Ezért alkalmazhatjuk az időtől független degenerált perturbációs számítás módszerét, hogy meghatározzuk a perturbált két-elektronos rendszer energiaszintjeit és koordináta-hullámfüggvényeit. A 2-szeresen elfajult nívók esetére vonatkozó összefüggéseket a 6.1.3. fejezet végén találjuk. Ezekből rögtön adódik, hogy a perturbált rendszer energiaszintjei:

$$E_{\pm} = \varepsilon_{r,s} + K \pm |A|, \quad (\text{H.9})$$

ahol

$$\begin{aligned} K &= e^2 \int d^3r_1 \int d^3r_2 \frac{|\phi_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2}{r_{12}} = \int d^3r_1 \int d^3r_2 \frac{|\phi_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2}{r_{12}} \\ &= \int d^3r_1 \int d^3r_2 \frac{|\varphi_r(\vec{r}_1)|^2 |\varphi_s(\vec{r}_2)|^2}{r_{12}} > 0 \end{aligned} \quad (\text{H.10})$$

az elektronok közötti taszító kölcsönhatás Coulomb-energiája és

$$\begin{aligned} A &= e^2 \int d^3r_1 \int d^3r_2 \frac{\phi_1^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}{r_{12}} = e^2 \int d^3r_1 \int d^3r_2 \frac{\phi_2^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\phi_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}{r_{12}} \\ &= e^2 \int d^3r_1 \int d^3r_2 \frac{\varphi_r^*(\vec{r}_1)\varphi_s^*(\vec{r}_2)\varphi_r(\vec{r}_2)\varphi_s(\vec{r}_1)}{r_{12}} \end{aligned} \quad (\text{H.11})$$

az úgynevezett „kicserélődési energia”. Az E_+ energiájú állapot koordináta-hullámfüggvénye,

$$\psi_+(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_r(\vec{r}_1) \varphi_s(\vec{r}_2) + \varphi_r(\vec{r}_2) \varphi_s(\vec{r}_1) \right) \quad (\text{H.12})$$

szimmetrikus, az E_- energiájú állapot koordináta-hullámfüggvénye,

$$\psi_-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_r(\vec{r}_1) \varphi_s(\vec{r}_2) - \varphi_r(\vec{r}_2) \varphi_s(\vec{r}_1) \right) \quad (\text{H.13})$$

pedig antiszimmetrikus a 2 elektron helyzetvektorainak felcserélésével szemben.

Ahhoz, hogy megkapjuk két-elektronos rendszer teljes hullámfüggvényét, ami a Pauli-elvet is figyelembe veszi, vagyis amelyik a 2 elektron helyzetvektorának és spinvetületének felcserélésével szemben antiszimmetrikus, mindkét esetben meg kell szerkesztünk a két-elektronos rendszer spin-hullámfüggvényeit. Mivel a $\hat{H}$ Hamilton-operátor nem tartalmaz semmilyen spinfüggést, azért a teljes $\Psi(1, 2)$ hullámfüggvény a $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ koordináta-hullámfüggvény és a $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$ két-részecskés spin-hullámfüggvény szorzata, vagyis

$$\Psi(1, 2) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi(\sigma_1, \sigma_2) \quad (\text{H.14})$$

alakú. Ennek a Pauli-elv értelmében a 2 elektron felcserélésével szemben antiszimmetrikusnak kell lennie:

$$\Psi(1, 2) = -\Psi(2, 1). \quad (\text{H.15})$$

Ez azt jelenti, hogy az E_+ energiaszinthez antiszimmetrikus, az E_- energiaszinthez pedig szimmetrikus spin-hullámfüggvénnyel leírt spinállapotnak kell tartoznia. Az $s = \frac{1}{2}\hbar$ spinű elektronnak 2 spin-sajátállapota van, $\chi_{\pm}(\sigma)$, amelyekre

$$\hat{s}_z \chi_{\pm}(\sigma) = \pm \frac{1}{2} \hbar \chi_{\pm}(\sigma). \quad (\text{H.16})$$

A két-elektronos rendszer eredő $\hat{S} = \hat{s}_1 + \hat{s}_2$ spinjének a négyzete, $\hat{S}^2$ és tetszőleges irányú z -tengelyre vett vetülete, $\hat{S}_z$ egymással és az egyes elektronok $\hat{s}_a^2$ operátoraival felcserélhető operátorok,

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0, \quad [\hat{S}^2, \hat{s}_a^2] = 0, \quad [\hat{S}_z, \hat{s}_a^2] = 0 \quad (a = 1, 2). \quad (\text{H.17})$$

Ezért a két-elektronos spinállapotok az eredő spin négyzetének $\hbar^2 S(S+1)$ és vetületének $\hbar M_s$ értékével, azaz az (S, M) kvantumszámokkal jellemezhetők.

A két egy-részecskés spinállapotból egyetlen antiszimmetrikus 2-részecskés spin-hullámfüggvényt tudunk csak képezni:

$$\chi_{00}(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_+(\sigma_1) \chi_-(\sigma_2) - \chi_-(\sigma_1) \chi_+(\sigma_2) \right), \quad (\text{H.18})$$

amikor az egyik elektron spinje felfelé, a másiké lefelé mutat. A kapott két-elektronos spinállapot az $\hat{S}^2$ és $\hat{S}_z$ operátoroknak az $S = 0$, $M_S = 0$ sajátértékekkel jellemzett közös sajátállapota,

$$\hat{S}^2 \chi_{00} = 0 \chi_{00}, \quad \hat{S}_z \chi_{00} = 0 \chi_{00} \quad (\text{H.19})$$

mint arról közvetlen számolással könnyen meg lehet győződni. Az E_+ energiaszint-hez tehát egyetlen bázisállapot tartozik, amelynek teljes hullámfüggvénye:

$$\Psi_+(1, 2) = \psi_+(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi_{00}(\sigma_1, \sigma_2). \quad (\text{H.20})$$

Az $S = 0$ eredő spinű héliumatomot **parahéliumnak** nevezik. Az $S = 0$ állapot spinszinglet, amikor az S_z spinvetületnek egyetlen lehetséges sajátértéke az $M_S = 0$.

A két egy-elektronos spinállapotból 3 darab szimmetrikus két-elektronos spin-hullámfüggvényt tudunk szerkeszteni:

$$\chi_{11}(\sigma_1, \sigma_2) = \chi_+(\sigma_1) \chi_+(\sigma_2), \quad (\text{H.21})$$

$$\chi_{10}(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_+(\sigma_1) \chi_-(\sigma_2) + \chi_-(\sigma_1) \chi_+(\sigma_2) \right), \quad (\text{H.22})$$

$$\chi_{1-1}(\sigma_1, \sigma_2) = \chi_-(\sigma_1) \chi_-(\sigma_2). \quad (\text{H.23})$$

Ezek az állapotok az $S = 1$ eredő spinhez és rendre az $M_S = +1, 0$, és -1 spinvetülethez tartoznak. Következésképpen az E_- energiaszint $S = +1$ spinállapotú, úgynevezett **ortohélium** esetén valósulhat meg. Ez az energiaszint a spinvetület tekintetében $2 \cdot 1 + 1 = 3$ -szorosán elfajult; a hozzá tartozó páronként ortogonális teljes hullámfüggvények:

$$\Psi_{M_S}(1, 2) = \psi_-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi_{1 M_S}(\sigma_1, \sigma_2). \quad (\text{H.24})$$

Az $M_S = +1, 0$, és -1 esetek rendre annak felelnek meg, hogy mindkét elektron spinje felfelé mutat, hogy az egyik elektron spinje felfelé, a másiké pedig lefelé mutat, és hogy mindkét elektron spinje lefelé mutat.

Végül specifikálhatjuk az elektron-konfigurációt, hogy elkezdhezzük felépíteni a parahélium ($S = 0$) és az ortohélium ($S = 1$) energiaspektrumát. Tekintsük először az $1s^2$ konfigurációt, amikor mindkét elektron az $1s$ állapotban van, de a Pauli-elv miatt ellentétes spinvetületekkel. Ekkor $\varphi_r = \varphi_s \equiv \varphi_{1s}$ és $\varepsilon_{r,s} = 2\varepsilon_{1s}$. Ilyenkor csak szimmetrikus két-részecskés koordináta-hullámfüggvény létezik, tehát az $S = 0$ eset valósul meg: a hélium-atom alapállapota a parahéliumban valósul meg $E_1^{\text{para}} = 2\varepsilon_{1s} + K + |A| > 2\varepsilon_{1s}$ energiával. A növekvő energia szerint következő állapotokat az $1s^1 2s^1$ konfiguráció szolgáltatja, amikor $\varphi_r(\vec{r}) = \varphi_{1s}(\vec{r})$, $\varphi_s(\vec{r}) = \varphi_{2s}(\vec{r})$ és $\varepsilon_{r,s} = \varepsilon_{1s} + \varepsilon_{2s} > 2\varepsilon_{1s}$, mert $\varepsilon_{2s} > \varepsilon_{1s}$. Ekkor létezik a szimmetrikus és az antiszimmetrikus két-elektronos koordináta-hullámfüggvény is. Így a parahélium

($S = 0$) esetén az $E_2^{\text{para}} = \varepsilon_{1s} + \varepsilon_{2s} + K + |A| > E_1^{\text{para}}$ első gerjesztett állapotot kapjuk. Az ortohélium esetében pedig az $E_1^{\text{orto}} = \varepsilon_{1s} + \varepsilon_{2s} + K - |A|$ energiájú állapotot találjuk, amelyre $E_1^{\text{para}} < E_1^{\text{orto}} < E_2^{\text{para}}$ adódik számszerűen. Az ortohélium legalacsonyabb energiájú állapota tehát a hélium-atom gerjesztett állapota, ami a tapasztalat szerint metastabil állapot, amelynek élettartama kb. 8000 s, ami egy „örökkévalóságnak” tűnik a He-atom többi gerjesztett állapotainak tipikus nanoszekundum nagyságrendű élettartamaihoz képest. A tényleges viszonyokat jól tükrözik az alábbi kísérleti adatok: $E_2^{\text{para}} - E_1^{\text{para}} \approx 20,55$ eV és $E_1^{\text{orto}} - E_1^{\text{para}} \approx 19,77$ eV. (Érdekességgént és viszonyítási alapként a héliumatom alapállapotában az ionizációs energia $\approx 24,47$ eV, azaz ennyi energiát kell közölni az egyik elektronnal az első elektron kiszakításához.)

Hivatkozások

- [1] L.D. Landau, E.M. Lifsic, *Elméleti fizika III., Kvantummechanika* (Tankönyvkiadó, Budapest, 1976)
- [2] Marx Gy., *Kvantummechanika* (Műszaki, Budapest, 1971)
- [3] D.I. Blohincev, *Osznovü kvantovoj mechnyiki*, (Nauka, Moszkva, 1983; hatodik, javított kiadás)
- [4] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, (Wiley, New York, 1961), pp. 249-250.
- [5] D. Rischke, *Theoretische Physik IV: Quantenmechanik I*, [https : //itp.uni – frankfurt.de](https://itp.uni-frankfurt.de) > *SkriptQM_I* (2011).
- [6] W. Greiner, *Theoretische Physik IV: Quantenmechanik I*, (Harri Deutsch, Frankfurt am Main, 1984).
- [7] J. Neumann, *A kvantummechanika matematikai alapjai*, (Akadémiai Kiadó, Budapest, 1980).
- [8] Geszti T., *Kvantummechanika*, (Typotex, Budapest, 2007).
- [9] Ádám P. és Janszky J., *Koherens állapotok a kvantumoptikában*, *Fizikai Szemle*, **10**, 325 (2006).
- [10] F. Schwabl, *Quantum Mechanics*, (Springer, Berlin, 1992).