

*”Megértettük, hogy a múlt létezik,
de a jövőendő nem.”
Teller Ede*

KVANTUMMECHANIKA

jegyzet

dr. Apagyí Barnabás
egyetemi docens
Elméleti Fizika Tanszék

ELŐSZÓ

Ez a jegyzet a Műegyetem mérnök-fizikus szakán tanuló diákoknak kíván segítséget nyújtani kvantummechanikai tanulmányaik megkezdéséhez. Önmagában e kis jegyzet nem elegendő a kvantummechanika tárgy eredményes műveléséhez; a hallgatók figyelmébe ajánlom elsősorban a két kiváló magyar nyelvű Kvantummechanika c. tankönyvet ("a Marx-ot" és a "Nagy Károlyt"), valamint a Landau magyar fordítását. Ezenkívül különösképpen ajánlom a Fizikai Intézet könyvtárában fellelhető "Schwablet", és a több példányban rendelkezésre álló és így kikölcsönözhető angol nyelvű Kvantummechanika kézikönyveket.

Hálás köszönettel tartozom Frenkel Andor és Orosz László barátaimnak, akik a kéziratot végigolvasva számos építő jellegű kritikával, javaslattal éltek s így hozzájárultak a szöveg esetlegességeinek javításához, pontossabbá tételéhez.

Végül, irodalmi hivatkozásként álljon itt a felhasznált művek jegyzéke, amelyekből a mérnökfizikusok számára ötödfélévben heti 4+2-ben leadott anyag összeállt [szögletes zárójelben álló számok a jegyzet azon fejezeteire utalnak, ahol a felhasználás megtörtént]: Marx György: Kvantummechanika (Műszaki Kiadó, 1971) [1,2,3,4,5,7]; Nagy Károly: Kvantummechanika (Tankönyvkiadó, 1978) [8]; F. Schwable: Quantenmechanik (Springer-Lehrbuch, 1990) [4,7]; A.Z. Capri: Nonrelativistic Quantum Mechanics (Benjamin/Cummings, 1985) [4]; L.J. Schiff: Quantum Mechanics (McGraw-Hill, 1955) [6]; C.J. Joachain: Quantum Collision Theory (North-Holland, 1975) [6].

Budapest, 1996 április.

Apagyfi Barna

TARTALOMJEGYZÉK

1. A KLASSZIKUS FIZIKA ÉRVÉNYESSÉGÉNEK HATÁRAI	1
1.1. HŐMÉRSÉKLETI SUGÁRZÁS.	2
1.2. SZILÁRD ANYAG FAJHŐJE. FÉNYELEKTROMOS JELENSÉG. COMPTON EFFEKTUS.	5
1.3. AZ ANYAG HULLÁMTERMÉSZETE.	8
1.4. RUTHERFORD KÍSÉRLET, AZ ATOM SZERKEZETE. AZ ATOMOK VONALAS SZÍNKÉPE. FRANCK-HERTZ KÍSÉRLET.	12
1.5. A BOHR-FÉLE ATOMMODELL ÉS KORLÁTAI.	14
2. HULLÁMMECHANIKA	16
2.1. SCHRÖDINGER HULLÁMEGYENLETE	17
2.1.1. AZ IDŐTŐL FÜGGŐ SCHRÖDINGER EGYENLET	17
2.1.2. AZ IDŐTŐL FÜGGETLEN (STACIONÁRIUS) SCHRÖDINGER EGYENLET	18
2.2. AZ ÁLLAPOTEGYENLETBŐL FAKADÓ NÉHÁNY TULAJDONSÁG.	20
2.2.1. KÜLÖNBÖZŐ SAJÁTÉRTÉKEKHEZ TARTOZÓ SAJÁTFÜGGVÉNYEK ORTOGONÁLISAK EGYMÁSRA.	20
2.2.2. $\psi(r)$ DERIVÁLTJA FOLYTONOS A POTENCIÁL LEGFELJEBB VÉGES SZAKADÁSSAL RENDELKEZŐ HELYÉN	21
2.2.3. KONTINUITÁSI EGYENLET.	22
2.2.4. EHRENFEST TÉTELE.	23
2.3. A SCHRÖDINGER EGYENLET MEGOLDÁSA NÉHÁNY EGYSZERŰ PROBLÉMÁRA	25
2.3.1. RÉSZECSCKE EGYDIMENZIÓS POTENCIÁLDOBOZBAN.	25
2.3.2. RÉSZECSCKE TÉRBELI POTENCIÁLDOBOZBAN.	28
2.3.3. LINEÁRIS HARMONIKUS OSZCILLÁTOR.	29
3. A KVANTUMMECHANIKA MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI ALAPJAI	34
3.1. OPERÁTOROK ÉS REGULÁRIS FÜGGVÉNYEK	35
3.1.1. A HILBERT TÉR.	39
3.1.2. OPERÁTOROK.	40
3.1.3. HERMITICITÁS ÉS ÖNADJUNGÁLTSAĞ.	41
3.2. OPERÁTOROKKAL ÉS REGULÁRIS FÜGGVÉNYEKSEL KAPCSOLATOS TÉTELEK	43
3.3. A FIZIKAI MÉRÉS ALAPTÖRVÉNYE	44
3.4. HEISENBERG-FÉLE FELCSERELÉSI RELÁCIÓK	46
3.5. HEISENBERG-FÉLE HATÁROZATLANSÁGI ÖSSZEFÜGGÉSEK	48
3.6. AZONOSSÁG ELVE	53

4. A FIZIKAI MENNYISÉGEKET REPREZENTÁLÓ OPERÁTOROK SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI	56
4.1. A KOORDINÁTA OPERÁTOR SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI (DISZTRIBÚCIÓK. FOLYTONOS SAJÁTÉRTÉK SPEKTRUM ESETE)	57
4.2. AZ IMPULZUS OPERÁTOR SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI	59
4.3. AZ IMPULZUSMOMENTUM OPERÁTOR SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI	60
4.3.1. AZ IMPULZUSMOMENTUM OPERÁTOR KOMPONENSEINEK FELCSERÉLÉSI RELÁCIÓI.	61
4.3.2. AZ IMPULZUSMOMENTUM z -KOMPONENSÉNEK OPERÁTORA ÉS SAJÁTÉRTÉKEI.	61
4.3.3. AZ IMPULZUSMOMENTUM NÉGYZETÉNEK SAJÁTÉRTÉK PROBLÉMÁJ.	63
4.3.4. L_z ÉS L^2 SAJÁTÉRTÉKEI A CSERERELÁCIÓK FELHASZNÁLÁSÁVAL.	66
4.3.5. AZ IMPULZUSMOMENTUM SAJÁTÉRTÉKEINEK ÉRDEKESSÉGEI.	68
4.3.6. A KÉTATOMOS MOLEKULÁK FORGÁSI (ROTÁCIÓS) ENERGIASPEKTRUMA.	69
4.4. AZ ENERGIA OPERÁTORÁNAK SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI.	70
4.4.1. A HIDROGÉNATOM ÉS A HIDROGÉNSZERŰ IONOK KVANTUMELMÉLETE.	71
4.4.2. A HIDROGÉNATOM VONALAS SZÍNKÉPE.	78
4.5. A SPIN OPERÁTORÁNAK SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI.	79
4.5.1. KÍSÉRLETI BIZONYÍTÉKOK AZ ELEKTRONSPIN LÉTÉRE.	79
4.5.2. A SPINOPERÁTOR SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI.	82
4.5.3. A PAULI-SCHRÖDINGER EGYENLET	83
4.5.4. A SPINOPERÁTOR IDŐBELI VÁLTOZÁSA.	83
5. KÖTÖTT ÁLLAPOTOK	84
5.1. PAULI-ELV.	85
5.2. PERIÓDUSOS RENDSZER. ATOMOK	88
5.3. KÉTTESZT PROBLÉMA. DEUTÉRIUM. IDŐTŐL FÜGGETLEN PERTURBÁCIÓSZÁMÍTÁS. A HÉLIUMATOM	94
5.3.1 A HIDROGÉNATOM MINT KÉTTESZT PROBLÉMA. A DEUTÉRIUM.	94
5.3.2. AZ IDŐTŐL FÜGGETLEN (SCHRÖDINGER-FÉLE) PERTURBÁCIÓSZÁMÍTÁS.	95
5.3.3. A HÉLIUMATOM.	101
5.4. VARIÁCIÓS ELV. RITZ ELJÁRÁS. HARTREE-FOCK EGYENLETEK. ÖNKONZISZTENS ELJÁRÁS.	104
5.4.1. VARIÁCIÓS ELV ÉS A SCHRÖDINGER EGYENLET. A RITZ-FÉLE VARIÁCIÓS MÓDSZER.	104
5.4.2. L-S ÉS j-j CSATOLÁS.	106
5.4.3. IMPULZUSMOMENTUM ÖSSZEADÁSI SZABÁLYOK.	107
5.4.4. A HARTREE-FOCK MÓDSZER.	109
A) HARTREE MÓDSZERE.	109
6. SZÓRÁSI ÁLLAPOTOK	112
6.1. EGYDIMENZIÓS SZABAD MOZGÁS	113
6.2. EGYDIMENZIÓS SZÓRÁS	116
6.2.1. SZÓRÓDÁS EGYDIMENZIÓS POTENCIÁLGÁTON	116

6.2.2. POTENCIÁLCSAPDA, VIRTUÁLIS ENERGIASZINTEK	120
6.2.3. SZÓRÓDÁS PERIÓDIKUS POTENCIÁLGÁTON. (FÉMEK, FÉLVEZETŐK, SZIGETELŐK MODELLEZÉSE.)	121
6.3. HÁROMDIMENZIÓS SZÓRÁS	125
6.3.1. SZÓRÁSI HATÁSKERESZTMETSZET	126
6.3.2. SZÓRÁSAMPLITÚDÓ	127
6.3.3. OPTIKAI TÉTEL.	131
6.4. SZÓRÓDÁS GÖMBSZIMMETRIKUS POTENCIÁLON. PARCIÁLIS HULLÁMOK MÓDSZERE.	133
6.4.1. FÁZISTOLÁS.	138
6.4.2. LIPPMANN-SCHWINGER EGYENLET. BORN SOROZAT.	141
6.4.3. COULOMB SZÓRÁS. MÓDOSÍTOTT COULOMB SZÓRÁS.	143
7. MOZGÁS ELEKTROMÁGNESES TÉRBEN	146
7.1. IDŐFÜGGŐ PERTURBÁCIÓSZÁMÍTÁS.	147
7.2. INDUKÁLT ABSZORPCIÓ ÉS EMISSZIÓ.	149
7.2.1. KIVÁLASZTÁSI SZABÁLYOK.	150
7.3. ÁTMENETI VALÓSZÍNŰSÉG ÁLLANDÓ PERTURBÁCIÓ ESETÉN. FERMI ARANYSZABÁLYA.	152
7.4. TÖLTÖTT RÉSZECSCKE HAMILTON OPERÁTORA ELEKTROMÁGNESES TÉR JELENLÉTE ESETÉN	155
7.4.1. ÁLLANDÓ MÁGNESES TÉR ESETE.	155
7.4.2. A HIDROGÉNATOM ENERGIANÍVÓINAK ELTOLÓDÁSA HOMOGÉN ÁLLANDÓ MÁGNESES TÉR HATÁSÁRA.	159
7.5. KINETIKUS ÉS KANONIKUS IMPULZUS FELCSERÉLÉSI RELÁCIÓI	159
7.6. A HULLÁMFÜGGVÉNY VÁLTOZÁSA MÉRTÉKTRANSZFORMÁCIÓ HATÁSÁRA	159
7.7. AHARONOV-BOHM (AB) EFFEKTUS (1959)	161
7.8. FLUXUSKVANTÁLÁS SZUPRAVEZETŐKBEN	163
7.9. SZABAD ELEKTRONOK MOZGÁSA HOMOGÉN MÁGNESES TÉRBEN (LANDAU-NÍVÓK) ..	164
7.10. HOMOGÉN ELEKTROMOS TÉR HATÁSA AZ ATOMI NÍVÓKRA (STARK-EFFEKTUS)	165
8. RELATIVISZTIKUS KVANTUMMECHANIKA. REPREZENTÁCIÓELMÉLET	168
8.1. A DIRAC EGYENLET.	169
8.2. AZ ELEKTROMÁGNESES TÉRREL KÖLCSÖNHATÓ RÉSZECSCKE DIRAC EGYENLETE.	173
8.3. A DIRAC EGYENLET ÉS A SPIN.	174
8.4. AZ ELEKTRON SAJÁT MÁGNESES MOMENTUMA.	178
8.5. AZ ELEKTRON SZABAD MOZGÁSA (A_μ).	181
8.6. A HIDROGÉNATOM KVANTUMELMÉLETE A DIRAC EGYENLET ALAPJÁN.	185
8.7. SPIN-PÁLYA KÖLCSÖNHATÁS.	189
8.8. REPREZENTÁCIÓ-ELMÉLET.	190
8.8.1. FOLYTONOS ÉS DISZKRÉT REPREZENTÁCIÓK.	190
8.8.2. KVANTUMMECHANIKAI KÉPEK.	198

1. A KLASSZIKUS FIZIKA ÉRVÉNYESSÉGÉNEK HATÁRAI

A XIX. század végén mindössze néhány probléma maradt megoldatlanul a fizika egyes fejezeteiből. Ilyen volt például a hőmérsékleti sugárzás problémaköre, a szilárd anyag fajhőjének viselkedése a hőmérséklet függvényében, és egyes anyagok ún. láthatatlan sugárzásának megmagyarázása. Abban azonban szinte minden fizikus egyetértett, hogy ezen problémák megértése (azaz a megfigyelt jelenségeknek matematikai formulákba való sűrítése) a klasszikus mechanika, az elektrodinamika, a termodinamika, vagy a statisztikus mechanika jól kidolgozott keretein belül lehetséges, és csupán idő kérdése a megfelelő válasz megadása.

Ezzel szemben, éppen ezen megválaszolatlan kérdések voltak azok, amelyek mintegy kikényszerítették egy új gondolkodásmód, egy új tudományág létrejöttét, amelyet ma KVANTUMMECHANIKA névvel illetünk. A kvantummechanika tudománya nyitott utat az anyag mikrostruktúrájának megértéséhez, feltárásához, a világról alkotott képünk módosulásához.

1.1. HŐMÉRSÉKLETI SUGÁRZÁS (Rayleigh-Jeans-, Wien-, Planck-féle sugárzási törvény).

Feketetest: minden beeső fényt elnyel $\Rightarrow$ minden anyagi testnél erősebben sugároz izzítás hatására. (Egy lehetséges megvalósítása: lyuk egy a oldalú üreges fémkockán.)

Kérdés: adott T hőmérsékleten mennyi energiát sugároz ki a feketetest egységnyi térfogata a fény egységnyi frekvencia-intervallumára vonatkoztatva, azaz

$$U(\nu, T) = ?$$

A fény elektromágneses hullám λ hullámhosszal, ν frekvenciával ($\lambda\nu = c$, $c = 2,9979 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$ a fénysebesség.) Az üregben állóhullámok alakulnak ki. Állóhullámokat egydimenzióban így írhatjuk: $\psi(x) \sim \sin kx$, ahol $\psi(0) = \psi(a) = 0$ a határfeltételek miatt.

Tehát a k hullámszámra a következő feltétel adódik:

$$ka = n\pi \rightarrow k = n\frac{\pi}{a} = \frac{2\pi}{\lambda} = 2\pi\frac{\nu}{c}, \quad n = 0, 1, \dots$$

A feketetestet **üregrezonátor**ként foghatjuk fel, amelyben térbeli állóhullámok alakulnak ki. Ezek hullámszám vektorának három komponensére a következő feltételek adódnak:

$$k_x a = n_1 \pi, \quad n_1 = 0, 1, \dots$$

$$k_y a = n_2 \pi, \quad n_2 = 0, 1, \dots$$

$$k_z a = n_3 \pi, \quad n_3 = 0, 1, \dots$$

$$\text{azaz} \Rightarrow k^2 = \frac{\pi^2}{a^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) = 4\pi^2 \frac{\nu^2}{c^2}$$

Meghatározzuk a lehetséges (n_1, n_2, n_3) **módusok** Z számát $\nu' < \nu$ esetére.

$$\text{Jelölés: } R^2 \equiv n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = \left(\frac{2\pi\nu}{c} \frac{a}{\pi}\right)^2$$

A teljes térfogatban ν -nél kisebb módusok Z száma az R sugarú gömb térfogatának nyolcada, szorozva 2-vel (a kétféle módus miatt):

$$Z(\nu) = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} R^3.$$

A ν és $\nu + d\nu$ közötti módusok dZ száma $V = a^3$ térfogatban:

$$dZ(\nu) = 8\pi \left(\frac{a}{c}\right)^3 \nu^2 d\nu = \frac{8\pi}{c^3} V \nu^2 d\nu$$

Mennyi energiát képviselnek ezek a módusok (oszillátorok)?

Ha egy oszillátorra jutó átlagos energia $\bar{\epsilon}$, akkor a ν és $\nu + d\nu$ közötti frekvencia intervallumban térfogategységenként

$$dW = \frac{dZ}{V} \bar{\epsilon} = \frac{8\pi}{c^3} \bar{\epsilon} \nu^2 d\nu \equiv U(\nu, T) d\nu$$

energia van, azaz

$$U(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} \bar{\epsilon} \nu^2. \quad (1)$$

A statisztikus mechanika képes az

$$\bar{\epsilon} = \bar{\epsilon}(T) = E_{tot}/N_{tot}$$

átlagenergia meghatározására hőmérsékleti egyensúly esetén. Legyen ui. az N_{tot} számú *megkülönböztethető* objektum (oszillátor) közül N_n számúnak ϵ_n energiája és *tegyük fel*, hogy

$$\epsilon_n = n \epsilon_0, \quad n = 1, 2, \dots$$

(Vegyük észre, hogy $\epsilon_0 \rightarrow 0$ határátmenet esetén az egyes módus-csoportok közötti energia *folytatosan* változik, amint azt megszámlálhatóan végtelen számú módus esetén el is várjuk első pillanatban.)

A Boltzmann eloszlás szerint (k_B a továbbiakban a Boltzmann állandót jelöli: $k_B = 1,38 \times 10^{-23} J/^{\circ}K = 3,29 \times 10^{-24} cal/^{\circ}K$):

$$\frac{N_n}{N_{tot}} = \frac{e^{-\frac{\epsilon_n}{k_B T}}}{\sum_n e^{-\frac{\epsilon_n}{k_B T}}}$$

A rendszer egyetlen objektumára jutó átlagos energia ($x = 1/k_B T$):

$$\begin{aligned} \bar{\epsilon}(T) &= \frac{E_{tot}}{N_{tot}} = \sum_n \frac{N_n}{N_{tot}} \epsilon_n = \\ \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n e^{-\epsilon_n x}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\epsilon_n x}} &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \epsilon_0 e^{-n \epsilon_0 x}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n \epsilon_0 x}} = \frac{-\partial/\partial x \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n \epsilon_0 x}}{1 + e^{-\epsilon_0 x} + (e^{-\epsilon_0 x})^2 + \dots} = \frac{-\partial/\partial x [1/(1 - e^{-\epsilon_0 x})]}{1/(1 - e^{-\epsilon_0 x})} = \frac{\epsilon_0 e^{-\epsilon_0 x} / (1 - e^{-\epsilon_0 x})^2}{1/(1 - e^{-\epsilon_0 x})} = \\ \frac{\epsilon_0 e^{-\epsilon_0 / k_B T}}{1 - e^{-\epsilon_0 / k_B T}} &= \end{aligned}$$

$$\bar{\epsilon}(T) = \frac{\epsilon_0}{e^{\epsilon_0 / k_B T} - 1} \quad (2)$$

$$= \frac{+\epsilon_0}{\epsilon_0 / k_B T + \frac{1}{2}(\epsilon_0 / k_B T)^2 + \dots} = \frac{k_B T}{1 + \frac{1}{2} \epsilon_0 / k_B T + \dots}$$

Klasszikus határátmenet ($\epsilon_0 \rightarrow 0$) esetén: $\bar{\epsilon}(T) = k_B T$ (ekvipartíció tétele!), azaz

$$U(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} k_B T \nu^2$$

Ez a Rayleigh-Jeans-féle sugárzási törvény, amely csak kis ν -kre érvényes, ui. a kisugárzott összenergiára ($E_{tot} = \int_0^{\infty} U(\nu, T) d\nu = \infty$) végtelent ad, ami nyilvánvaló ellentétben áll a tapasztalattal.

Planck gondolt arra 1900-ban, hogy a módusok átlagenergiája, $\bar{\epsilon}(T)$, esetleg túl erősen van képviselve a nagyfrekvenciás tartományban (s ettől lesz ∞ az energia), azaz $\bar{\epsilon}(T) < k_B T$ egyenlőtlenség teljesülésére lenne szükség nagy ν -k esetén. Ez elérhető az

$$\epsilon_0 = h\nu$$

munkahipotézis bevezetésével (ld. (2) utáni sorfejtés nevezőjét). Ezzel

$$U(\nu, T) = \frac{8\pi h}{c^3} \nu^3 \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}, \quad (3)$$

amely a **Planck-féle sugárzási törvény** ($h = 6,62620 \times 10^{-34} \text{ Js}$ a **Planck állandó**).

$\nu \rightarrow 0$ esetén visszaadja a **Rayleigh-Jeans törvényt**:

$$U \sim k_B T \nu^2,$$

$\nu \rightarrow \infty$ esetén pedig a **Wien-féle sugárzási törvényt**:

$$U \sim \nu^3 e^{-\frac{h\nu}{k_B T}},$$

amely

a sugárzás nagyfrekvenciás tartományában érvényes.

Ezenkívül megadja a ún. **Wien-féle eltolódási törvényt**:

$$\lambda_{max} T = \text{const}$$

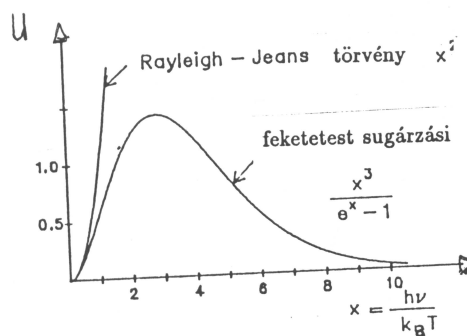
(λ_{max} jelenti az adott T hőmérséklethez tartozó maximális energiájú sugárzás hullámhosszát; a tétel bizonyításához nyilvánvalóan $dU/d\lambda = 0$ -t kell meghatározni.)

Továbbá megkapjuk a **Stefan-Boltzmann törvényt**, amely kimondja, hogy a teljes kisugárzott energia arányos a hőmérséklet negyedik hatványával:

$$E_{tot} = \int_0^\infty U(\nu, T) d\nu = \text{const } T^4$$

$$\left(= \frac{8\pi k_B^4}{15 h^3} T^4 \int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1} \right).$$

A Planck-féle sugárzási törvény teljes összhangban van a tapasztalattal. Amellett, hogy különféle gyakorlati alkalmazásai vannak (pl. csillagfelszín hőmérsékletek meghatározása), elvi jelentősége felbecsülhetetlen. Először jelent meg a Planck-féle **hatáskvantum**, a h állandó. Először jelent meg a kvantum fogalma kvantitatív módon, matematikai formulában. Az egyes frekvencia-módusok *legkisebb* energiája (az ϵ_0) nem lehet végtelenül kicsi, hanem véges adagokban, a frekvenciával arányos kvantumokban jelentkezik és a módusok energiái ennek az ϵ_0 kvantumnak egészszámú többszörösei lehetnek csak. A Planck-féle sugárzási törvény mérföldkő a fizika történetében, s egyben a kvantumfizika születését jelenti.



1.Ábra. A hőmérsékleti sugárzás intenzitáseloszlás görbéje.

1.2. SZILÁRD ANYAG FAJHŐJE (Einstein). FÉNYELEKTROMOS JELENSÉG (Einstein). COMPTON EFFEKTUS (Compton).

a) **SZILÁRD ANYAG FAJHŐJE.** [Vizsgálata megmutatta, hogy a szilárd anyag energiája is kvantált, mint a fényé.]

Fajhő (C): az az energia mennyiség, amelyet a gramm-molekulasúlynyi anyaggal közölni kell ahhoz, hogy hőmérsékletét egy fokkal emeljük (ekvivalens a molhővel):

$$C = \frac{\Delta E}{\Delta T} = \frac{dE}{dT}. \quad (4)$$

1 gramm-molekulasúlynyi anyagban $L = 6 \times 10^{23}$ molekula van.

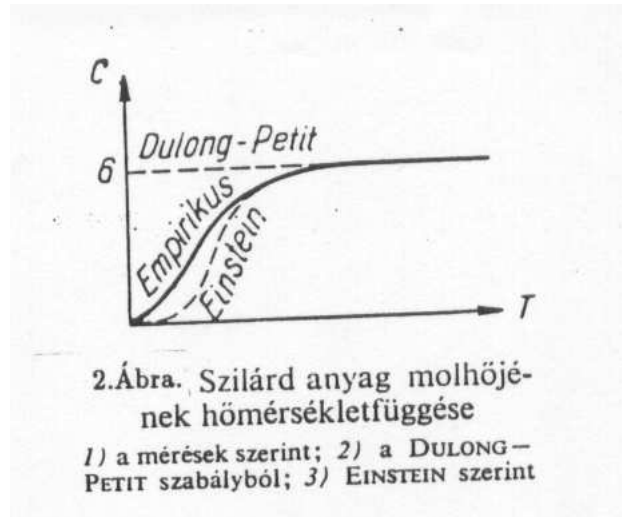
1 gramm-molekulasúlynyi kristályt $3L$ oszcillátorral jellemezhetjük.

1 gramm-molekulasúlynyi kristály (szilárd anyag) energiája:

$$E = 3L\bar{\epsilon}$$

($\bar{\epsilon}$ az egy módusra [oszcillátorra] jutó átlagenergia, L a Loschmidt szám).

Klasszikus határátmenetben ($\bar{\epsilon} \rightarrow k_B T$)



$$E = 3Lk_B T.$$

A fajhő: $C = dE/dT = 3Lk_B \approx 6 \text{ cal}/^\circ K$

Ez a **Doulong-Petit szabály**, amely kis hőmérsékletekre nem érvényes.

Hogy a $T \rightarrow 0$ viselkedést is megmagyarázza, Einsteinnek támadt az a merész gondolata 1906-ban, hogy alkalmazza a fény-oszcillátorokra egyszer már bevált eloszlási törvényt a szilárd testeket alkotó anyagi részecskék (hő-)rezgéseire is. Azaz

$$\bar{\epsilon} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} = \frac{k_B T_0}{e^{T_0/T} - 1}, \quad (5)$$

ahol $h\nu/k_B T = T_0/T$ (most T a változó, $T_0 = h\nu/k_B$ pedig egy kristályra jellemző mennyiség).

Ezzel a fajhő:

$$\begin{aligned} C &= 3L \frac{d\bar{\epsilon}}{dT} \\ &= -\frac{3Lk_B T_0}{(e^{T_0/T} - 1)^2} e^{T_0/T} \left(-\frac{T_0}{T^2} \right) = 3Lk_B \left(\frac{T_0}{T} \right)^2 \frac{e^{T_0/T}}{(e^{T_0/T} - 1)^2} \end{aligned} \quad (6)$$

Mármost két eset lehetséges:

$$T \gg T_0, \quad C \rightarrow 3Lk_B \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 \frac{1}{(T_0/T)^2} = 3Lk_B \approx 6 \text{ cal}/^\circ K,$$

azaz visszakaptuk a Dulong-Petit szabályt; a másik eset

$$T \ll T_0, \quad C \rightarrow 3Lk_B \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 e^{-T_0/T},$$

amely kvalitatíve megadja a fahő viselkedését kis hőmérsékletekre (2. ábra).

b) FÉNYELEKTROMOS JELENSÉG. [Bizonyítékot szolgáltat "fényrészecskék" (fotonok) létezésére.]

Tapasztalati tény, hogy egyes anyagok (pl. Na, vagy Zn) fénnel való besugárzás hatására *elektronokat* bocsátanak ki. A kibocsátott elektronok kinetikus energiájának maximuma független a fénysugár intenzitásától és csakis a fény frekvenciájától

(ν) függ, méghozzá lineárisan. Másrészt a fényintenzitás növelésével egyenes arányban nő a kibocsátott elektronok száma. E tapasztalati tények vezették Einsteint 1905-ben arra a felismerésre, hogy a fény és

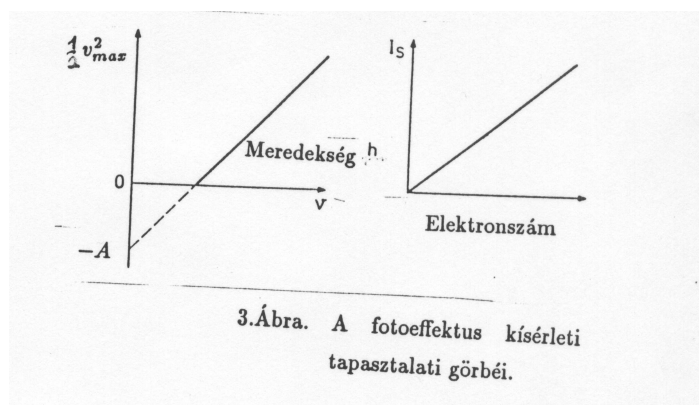
az anyag elektronjai között egyedi ütközési folyamat játszódik le, amelyre az energiamérleg a következőképpen írható:

$$h\nu = \frac{1}{2}mv_{max}^2 + A. \quad (7)$$

A az ún. kilépési munkát jelenti, amely energia ahhoz szükséges, hogy az elektron kiszabaduljon a fémbe kötött állapotából. A (7) összefüggés, amely teljes egyezésben áll a tapasztalattal, $E = h\nu$ energiamennyiséget tulajdonít az egyedi kölcsönhatási folyamatban résztvevő fényrészecskének. (vö. Planck $\varepsilon_0 = h\nu$ munkahipotézisével.)

Az egyedi elektronokkal kölcsönható fényrészecskéket Einstein **fotonoknak** nevezte el, és az ún. **tűsugárzás** (adott irányba haladó véges hosszúságú hullámvonulat) szemléleti képet fűzte a folyamathoz.

c) COMPTON EFFEKTUS (1923) [Bizonyítékot szolgáltat arra, hogy a fotonok $E = h\nu$ energiával és $\frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c}$ impulzussal rendelkeznek.]



3.Ábra. A fotoeffektus kísérleti tapasztalati görbéi.

A jelenség lényege abban áll, hogy anyagon való áthaladás (szóródás) révén a fény hullámhossza, ill. frekvenciája megváltozik (λ nő, ν csökken). A megváltozás mértéke csupán a szórási szög (θ) függvénye.

Képletbe sűrítve a tapasztalati tényeket, írhatjuk:

$$\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1 = \lambda_0(1 - \cos\theta), \quad (8)$$

ahol $\lambda_0 = h/mc$ a szóró anyagtól független fizikai állandó (m az elektron nyugalmi tömege).

(8) frekvenciákra érvényes alakja:

$$\Delta\nu = \nu_2 - \nu_1 = -\frac{h\nu_1^2}{mc^2}(1 - \cos\theta), \quad (9)$$

Mindkét tapasztalati képlet megmagyarázható a foton és a szóró anyag egy elektronja közötti kölcsönhatásra felírt energiamérleg és impulzusmérleg segítségével.

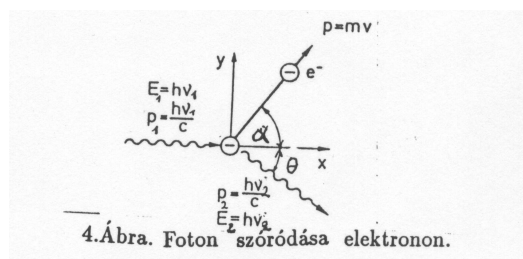
a) energiamérleg:

$$h\nu_1 = h\nu_2 + \frac{1}{2}mv^2;$$

b) impulzusmérleg (x és y irányban):

$$\frac{h\nu_1}{c} = \frac{h\nu_2}{c} \cos\theta + mv \cos\alpha,$$

$$0 = \frac{h\nu_2}{c} \sin\theta - mv \sin\alpha.$$



4.Ábra. Foton szóródása elektronon.

A három egyenlet elegendő az ismeretlen v (elektron sebesség) és az α (elektron eltérülési szög) kiküszöbölésére és a fenti (8)-(9) tapasztalati képletek levezetésére. A levezetésnél kihasználható az a további tapasztalat, hogy a megváltozások az eredeti frekvenciához, ill. hullámhosszhoz képest elhanyagolhatók (tehát pl. $\nu_1 \gg \Delta\nu = \nu_2 - \nu_1$, azaz $\nu_1 \approx \nu_2$).

1.3. AZ ANYAG HULLÁMTERMÉSZETE.

a) de BROGLIE-FÉLE HULLÁMOK. [Megtudjuk, hogy az anyagi részecskék is rendelkeznek hullámtulajdonságokkal]

de Broglie 1924-ben gondolt arra elsőként, hogy ha a fény, amely elektromágneses hullám, részecsketulajdonságokat mutat (ui. a fény energiával és impulzussal rendelkező foton-részecskékből áll), akkor talán fordítva is igaz, és minden mv impulzusú (m tömegű és v sebességű) részecske hullámtulajdonsággal is rendelkezik. A kapcsolatot a fény↔foton analógiából sejtette meg: a foton energiája $E = h\nu$, impulzusa $p = h\nu/c$; a fény hullámhossza kifejezhető a foton impulzusával

($\lambda\nu = c$ miatt) a következőképp: $\lambda = h/p$. Ezt általánosítva kis sebességű anyagi részecskére, kapjuk a hullámtulajdonságok és részecsketulajdonságok közti fontos **de Broglie-féle összefüggést**:

$$\lambda = \frac{h}{mv}. \quad (10)$$

Makroszkopikus világunkban a (10) által az anyagi testhez rendelt hullámhossz mérhetetlenül kicsiny. Pl. egy 1 tonnás autó (10) szerinti hullámhossza, miközben 100 km/h sebességgel halad, $\lambda_{\text{autó}} = 2.4 \times 10^{-37}$ m.

A mikroszkopikus világban azonban kimutatható λ létezése, azaz érvényre jut a részecskék hullám természete. Gyorsítsunk pl. elektronokat U feszültséggel. A gyorsítás hatására az elektronok $mv^2/2 = eU$ energiára tesznek szert (e az elektron töltése), amiből impulzusuk $p = mv = \sqrt{2meU}$ -nek adódik. Így az elektron hullámhossza:

$$\lambda_{\text{elektron}} = h/mv = h/\sqrt{2me} \cdot 1/\sqrt{U} = \sqrt{\frac{150}{U}} \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

(amennyiben U -t Volt-ban mérjük és figyelembe vesszük, hogy $m = 9,10940 \times 10^{-31} \text{ kg}$, $e = 1,60218 \times 10^{-19} \text{ C}$, $h = 6,6262 \times 10^{-34} \text{ Js}$). Összehasonlításképpen: egy atom átmérője $\approx 10^{-10}$ m = 1 Å, tehát az atomok világában az elektron hullám jellegének lényeges szerepe lehet.

b) Davisson-Germer ELEKTRON INTERFERENCIA KÍSÉRLETE (1927)

Hogy ez így van, azaz, hogy az anyagrészecskék interferenciára képesek, azt először Davisson és Germer mutatta ki 1927-ben, elektronnyalábot ejtve vékony fémfóliára. Az elektronok (feltételezett) hullámhosszát az előbbi képlet szerint U -val szabályozták. Egy szcintillációs felfogórnyőn olyan interferenciaképet észleltek, amilyent röntgensugárzással is kaptak (akkor, ha $\lambda_{\text{röntgen}} = \lambda_{\text{elektron}}$).

Magyarázat: egy λ hullámhosszal és $\nu = 1/\tau$ frekvenciával rendelkező, balról jobbra tovaterjedő, egydimenziós síkhullám (ami de Broglie feltételezése nyomán a szabad elektronhoz rendelendő) a következőképpen írható:

$$\Psi(x, t) = Ae^{2\pi i(\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{\tau})} = \Psi(x + \lambda, t + \tau)$$

(τ -t periódusidőnek hívjuk; egy szabad hullám tulajdonsága az, hogy térben λ szerint, időben τ szerint periódikus).

Mármint Ψ -t kifejezhetjük a hullámot karakterizáló ($\lambda, \tau = 1/\nu$) mennyiségek helyett az anyagi részecskék mozgására jellemző (p, E) mennyiségekkel is, de Broglie ($\lambda = h/p$), ill. Planck és Einstein ($E = h\nu = h/\tau$) által megadott elemi összefüggések segítségével:

$$\Psi(x, t) = Ae^{\frac{2\pi i}{h}(px - Et)} = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

ahol bevezettük (az exponensben) Dirac nyomán az ún. "h-vonás" állandót:

$$\hbar = h/2\pi = 1,05457 \times 10^{-34} \text{ Js} = 6.582 \times 10^{-16} \text{ eV s}.$$

Az elektron-hullám intenzitása, ami az ernyőn észlelhető: $I = |\Psi|^2 = |A|^2$.

Koherens forrásból származó elektronok hulláma szóródás után:

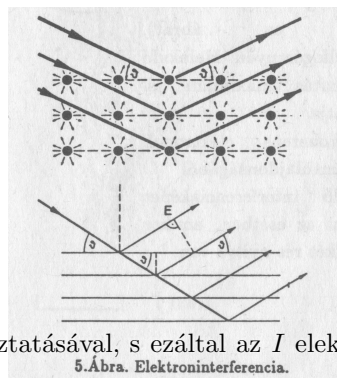
$$\Psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(p x - E t)} + Ae^{\frac{i}{\hbar}(p [x+d] - E t)}$$

(az egyik lehetséges pályán az elektron-hullám $d = d_1 + d_2$ úttal többet tesz meg, ld. az 5. ábrát.)

Ebből az intenzitás:

$$I = |\Psi|^2 = 2A^2(1 + \cos \frac{pd}{\hbar})$$

Mármost a d útkülönbség fix, és a fémbeli ráctávolsággal, valamint a fixen tartott beesési szöggel kapcsolatos. Az elektron impulzusa ($p = h/\lambda = h\sqrt{U/150}$), ill. λ hullámhossza viszont hangolható az elektront gyorsító U feszültség változtatásával, s ezáltal az I elektron-intenzitásban változást tapasztalhatunk az alábbiak szerint:



5.Ábra. Elektroninterferencia.

$$\cos \frac{pd}{\hbar} = \cos 2\pi \frac{p}{h} d = \cos 2\pi \frac{d}{\lambda} = \begin{cases} 1, & \text{ha } 2\pi \frac{d}{\lambda} = 2n\pi \rightarrow \lambda = \frac{d}{n} \rightarrow I = 4A^2 \\ 0, & \text{ha } 2\pi \frac{d}{\lambda} = (2n+1)\frac{\pi}{2} \rightarrow \lambda = \frac{4}{2n+1}d \rightarrow I = 2A^2 \\ -1, & \text{ha } 2\pi \frac{d}{\lambda} = (2n+1)\pi \rightarrow \lambda = \frac{2}{2n+1}d \rightarrow I = 0 (!) \end{cases}$$

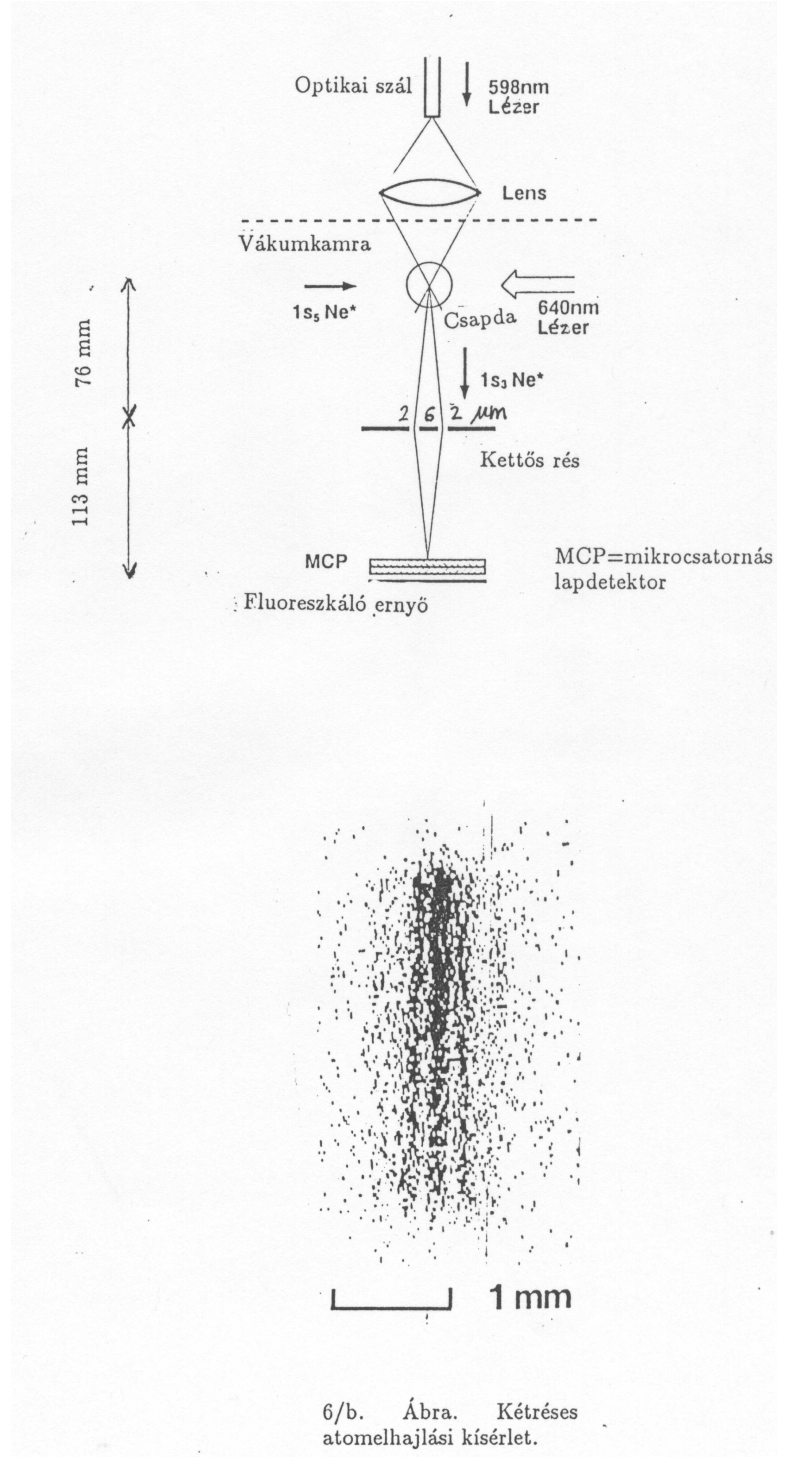
U változtatásával Davisson és Germer pontosan a fenti megfontolás alapján számított intenzitás növekedést (ill. hiányt !) észlelte.

c) JÖNSSON KÉTRÉSES (YOUNG-FÉLE) ELEKTRONELHAJLÁSI KÍSÉRLETE (1961)

Jönsson *elektronokkal* végezte el 1961-ben Young, a XVIII-XIX. században élt angol fizikus híres kétréses fényinterferencia kísérletét. A két $50 \mu\text{m} \times 0.3 \mu\text{m}$ keresztmetszetű rés egymástól $10 \mu\text{m}$ távolságra helyezkedik el (ld. az ábrát). A felfogóernyőn kialakuló intenzitás maximum jól mutatja a koherens elektronok hullámtulajdonságából fakadó interferenciaképet abban az esetben, amikor mindkét rés nyitva van.

d) ATOMEJTÉSES INTERFERENCIA KÍSÉRLET (1992)

F. és K. Shimizu, valamint H. Takuma japán fizikusok 1992-ben Tokióban ultra-lassú metastabil neon atomokkal végeztek el kétréses interferencia kísérletet. A két $2\ \mu\text{m}$ szélességű, egymástól $6\ \mu\text{m}$ távolságra elhelyezkedő résen (6.b Ábra) a mágneses csapdából a lézeres legerjesztés révén kiszabaduló, és a gravitációs erő hatására a résnél max. $2\ \text{m/s}$ sebességre szert tevő, $1s_3$ állapotban levő metastabilis *atomok interferenciája* okozza a megfigyelt tipikus elhajlási képet, amelyet a fluoreszkáló ernyőn (is) észleltek (részletek megtalálhatók: Phys. Rev. A 46, R17 (1992) alatt).

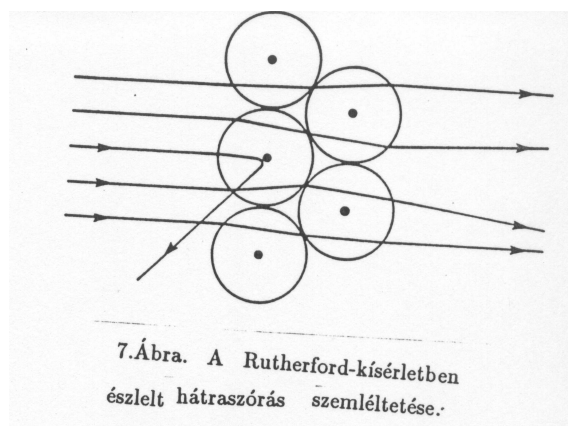


1.4. RUTHERFORD KÍSÉRLET, AZ ATOM SZERKEZETE. AZ ATOMOK VONALAS SZÍNKÉPE. FRANCK-HERTZ KÍSÉRLET.

a) **AZ ATOM SZERKEZETE, RUTHERFORD KÍSÉRLETE.** [Első evidencia arra nézve, hogy az anyagot alkotó atomok "darabos" szerkezetűek, térkitöltésük nem folytonos.]

Századunk elején J.J. Thompson, az elektron felfedezőjének atomképe volt általánosan elfogadott. Eszerint az atomot tömegének túlnyomó részét képviselő homogén eloszlású **pozitív töltés**, valamint ebben a folytonos háttértöltésben szabályosan elhelyezkedő, elektrodinamikai erők hatására egyensúlyban levő, a pozitív töltést leárnyékoló **elektronok** alkotják. Ez az atommodell csupán az atomok semlegességét és az elektronok származási helyét volt hivatott megmagyarázni, de pl. a vonalas színeképek keletkezésére már nem tudott kijelentést tenni.

Rutherford 1911-ben α -sugárzást bocsátott vékony fémfóliára. A Thompson-modell érvényessége esetén a $2e$ pozitív töltéssel rendelkező α -részecskéknek gyakorlatilag eltérülés nélkül kellett volna áthaladni az atomokat alkotó folytonos eloszlású pozitív felhőn. Ezzel szemben a beesési iránytól jelentős eltérülési szöggel szórt α -részecskéket is detektáltak a kísérletben, ami az atom túlnyomó tömegét alkotó pozitív töltés nem folytonos, hanem kis térfogatra koncentrált mivoltát jelentette.



Az atom ezen kis térfogatú, pozitív töltésű részét hívjuk **atommagnak**. Az atomnak csak az ilyen kis térfogatban elhelyezkedő pozitív töltésű része képes olyan intenzív elektromos erőteret létesíteni, amellyel a jelentős mértékű α -részecske eltérülést magyarázhatjuk. (Magfizikai kurzusban később részletes matematikai tárgyalást is nyer ez a kérdés.)

Rutherford tehát kísérlete révén felfedezte az atommagot. A kísérletből meghatározható volt az atommag töltése (Z), amely egyezőnek bizonyult a rendszámmal, az elemek periódusos rendszerben elfoglalt helyének sorszámaival. A kísérletből következtetni lehetett az atommag méretére is, amely $\sim 10^{-15}m$ -nek adódott. A helyes atomkép csak 1932-ben, a neutron felfedezése után alakult ki. Eszerint az atom Z protonból, N neutronból és Z elektronból áll, mérete $\sim 10^{-10}m$, tömegének túlnyomó része a magban koncentrálódik.

b) AZ ATOMOK VONALAS SZÍNKÉPE. [Megtudjuk, hogy az atomok csak meghatározott frekvenciájú fényt képesek emittálni, ill. abszorbeálni.]

A múlt század végén, e század elején, elsősorban Balmer, Ritz és Rydberg spektroszkópiai munkássága nyomán ismertté vált, hogy a hidrogéngáz által kibocsátott, ill. elnyelt fény spektruma (frekvenciákra való eloszlása) ún. *termekbe*, egész számokkal kapcsolatos mennyiségekbe rendezhető. Így pl. a hidrogéngáz látható színekére a következő képlet érvényes:

$$\frac{1}{\lambda_n} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{(2+n)^2} \right), \quad n = 1, 2, 3, 4 \dots$$

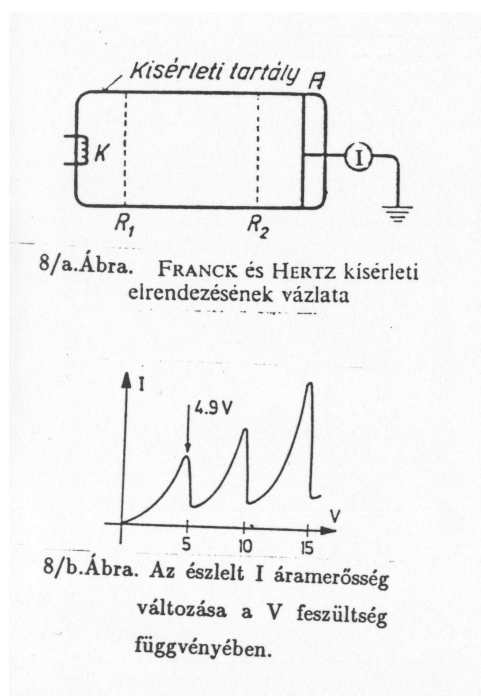
ahol $R = 10967775,9 \text{ m}^{-1}$ egy tapasztalatilag meghatározott konstans, az ún. Rydberg állandó.

c) A FRANCK-HERTZ KÍSÉRLET. [Megtudjuk, hogy az atomok energiából is csak meghatározott adagokat képesek felvenni.]

1913-ban, Bohr javaslatára, Franck és Hertz katódsugárcső felhasználásával az ábrán látható kísérletet végezte el. A csőben higanygőz van. A K katód és az R_1 rács közötti gyorsító feszültség V . Az R_1 és R_2 rácsok között nincs feszültségkülönbség, az R_2 rács és az A anód között pedig $-V$ lassító feszültség van. A kísérleti tapasztalat szerint a V gyorsító feszültség növelése hatására az anódra eljutó elektronok száma (az I áramerősség) egy ideig nő, majd $V = 4,9 \text{ V}$ elérésekor csökken, ezután újra nő. Hasonló intenzitás csökkenés figyelhető meg $V = n \times 4,9 \text{ eV}$ értéknél is (n egészszám).

Magyarázat: a Hg-gáz atomokkal az $n \times 4,9 \text{ eV}$ kinetikus energiájú elektronok

rugalmatlanul ütköznek, miközben energiát veszítenek, ezért nem képesek legyőzni az anód és R_2 közti lassító feszültséget, ez okozza az intenzitás csökkenést. Más V értékeknél az elektronok rugalmasan ütköznek az atomokkal, így növekvő feszültség hatására növekvő számban repülnek ki a katódból s érkezik el az anódra. Az atomok szempontjából ez azt jelenti, hogy csak bizonyos, meghatározott energiájú elektronokkal tudnak kölcsönhatásba lépni, azoktól energiát felvenni.



1.5. A BOHR-FÉLE ATOMMODELL ÉS KORLÁTAI.

1913-ban Bohr a hidrogénatom vonalas színeképének tanulmányozása során észrevette, hogy az atom elektronjának impulzuszórántumára és energiájára kirótt két kvantumfeltétel segítségével magyarázni tudja a színekép szerkezetét. Bohr két posztulátuma a következő volt:

a) az elektron csak meghatározott, kiválasztott pályákon keringhet és ezeken az ún. stacioner pályákon nem sugároz. A pályákat a **Bohr-féle kvantumfeltétel** határozza meg:

$$m_e v_n r_n = n \hbar, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (10)$$

ahol n a lehetséges pályákat számozza le, v_n és r_n jelöli az n -edik pályán keringő m_e tömegű elektron sebességét és a pálya sugarát.

b) Az atom az elektronnak egy E_n energiájú pályáról egy E_m energiájú pályára való átmenete közben fényt sugároz ki (ill. nyel el), amelynek ν frekvenciáját a következő összefüggés határozza meg:

$$E_n - E_m = \hbar \omega = h \nu [= \varepsilon_0 (!)]. \quad (11)$$

A két posztulátumhoz a következő meggondolásokat lehet fűzni. Az a) kvantumfeltétel (bár ezt Bohr még nem tudhatta) azt jelenti, hogy az elektronhoz tartozó de Broglie hullámhossz éppen egész számszor (n -szer) mérhető fel a körpálya kerületére. A (10)-es összefüggés ui. a következő alakba írható át:

$$2 r_n \pi = n \frac{h}{m_e v_n} = n \lambda_n,$$

amely éppen azt jelenthetné, hogy stacionárius állóhullámok (elektronhullámok) alakulnak ki az atomban. Másrészt – Ze töltésű magot feltételezve az atom középpontjában – az a) feltételt az erők egyensúlyát kifejező

$$m_e \frac{v_n^2}{r_n} = k \frac{Z e^2}{r_n^2}, \quad (k = 1/(4\pi\varepsilon_0), \quad \varepsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12} \text{ AsV}^{-1} \text{ m}^{-1} \text{ diel.konst})$$

képlettel ötvözve, kiszámíthatjuk az n -edik pályán keringő elektron v_n sebességét, ill. a pálya r_n sugarát:

$$v_n = k \frac{Z e^2}{\hbar n},$$

$$r_n = \frac{a_0}{Z} n^2,$$

ahol $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e k e^2} = 5,3 \times 10^{-11} \text{ m}$ egy állandót, az ún. Bohr sugarat jelöli.

Továbbá kiszámolható az n -dik pályán keringő elektron energiája:

$$E_n = E_{kin} + E_{pot} = \frac{1}{2} m_e v_n^2 - k \frac{Z e^2}{r_n} = -\frac{1}{2} \frac{m_e (k Z e^2)^2}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (12)$$

A b) posztulátum segítségével kiszámolhatjuk az $n \rightarrow m$ átmenethez tartozó fény hullámhosszát (λ_{nm} , $n > m$):

$$E_n - E_m = \frac{1}{2} \frac{m_e (k Z e^2)^2}{\hbar^2} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = h \nu_{nm} = \frac{h c}{\lambda_{nm}} \rightarrow$$

$$\rightarrow \frac{1}{\lambda_{nm}} = \frac{1}{4\pi} \frac{m_e}{\hbar^3 c} (kZe^2)^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Ezt a képletet összevetve a vonalas színeképek c. fejezetben felírt képlettel, láthatjuk a b) hipotézis további erejét: a korábban csak a mérésekből meghatározható tapasztalati állandót, az R Rydberg-állandót visszavezette korábban megismert fizikai állandókra.

$$R = \frac{1}{4\pi} \frac{m_e}{\hbar^3 c} (ke^2)^2 = 10967775,9 \text{ m}^{-1}.$$

Bár a (12)-es képlet nagy pontossággal megadja a hidrogénatom energiaszintjeit, s így spektrumának szerkezetét, a tizenhárom év múlva felfedezett kvantummechanika rávilágított a Bohr-féle atommodell tarthatatlanságára. Az első Bohr-féle posztulátum (a (10) egyenlet) szerint az impulzusmomentum értéke $n\hbar$, azaz a hidrogénatom alapállapotában is *van* impulzusmomentuma az elektronnak. Később látni fogjuk, hogy a kvantummechanika és a kísérletek szerint alapállapotban az impulzusmomentum értéke zérus. További hiányossága a Bohr-féle elméletnek, hogy többelektronos rendszerekre (pl. a He atomra) nem, vagy csak nagyon nehezen volt általánosítható (ellipszis pályák bevezetésével), de a szolgáltatott energiaspektrum kifejezések pontosságban kívánnivalót hagytak maguk után a (12) kifejezés pontosságához viszonyítva. Legfőbb baj azonban a Bohr-féle atommodellel kapcsolatban az, hogy az általa sugallt bolygórendszerhez hasonlatos atomkép teljesen tarthatatlan. A kvantummechanika megmutatta, hogy a pálya (tehát a sebesség és hely) fogalma a mikrovilágban nem értelmezhető, így az atomi elektronok mozgását a bolygók mozgásához hasonlítani nem lehetséges.

2. HULLÁMMECHANIKA

Az előző fejezetből kiderült, hogy *i*) bizonyos fizikai rendszerek energiája, vagy impulzusmomentuma csak meghatározott (diszkrét) értékeket vehet fel [kvantáltság elve]; *ii*) a részecske és hullám leírás között nincs elvi különbség: egyazon fizikai rendszer egyszer hullámként, másszor részecskeként mutatkozik meg a körülményektől függően [részecske-hullám – dualizmus elve].

Ezen újonnan feltárt jelenségek a klasszikus fizika egyik ágába sem voltak beilleszthetőek, így szükségszerűen kikényszerítődött a fizika egy új fejezete, amelyet **kvantummechanikának** nevezünk. Schrödinger és Heisenberg volt az a két fizikus, aki – egymástól függetlenül és formailag eltérő módon – 1926-ban matematikai alakban fogalmazta meg a fenti két elvet egyesítő törvényt. A Schrödinger-féle formalizmust *hullámmechanikának*, a Heisenberg alkotta kvantummechanikát *mátrixmechanikának* szoktuk nevezni. (Fizikai szempontból a két formalizmus ekvivalens egymással.)

Elsőként a differenciálegyenleten alapuló és hullámfüggvény fogalmat (és matematikai konstrukciót) használó Schrödinger-féle hullámmechanikával ismerkedünk meg. A mátrixokkal, sajátértékekkel és sajátvektorokkal operáló Heisenberg-féle mátrixmechanikát a későbbiekben fogjuk érinteni.

2.1 SCHRÖDINGER HULLÁMEGYENLETE

2.1.1. AZ IDŐTŐL FÜGGŐ SCHRÖDINGER EGYENLET

Schrödinger 1926-ban a fényre vonatkozó hullámgörbe analógiájára alapozva felállította a nemrelativisztikus részecskék tér- és időbeli mozgását leíró hullámgörbét. Egy időben és térben tovaterjedő, $\mathbf{k}$ hullámszámmal és ω körfrekvenciával rendelkező síkhullám a következőképp írható fel:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)},$$

ahol kihasználtuk a $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ és $\omega = E/\hbar$ összefüggéseket (A egy állandót jelöl).

Mármint a fényre, amely *relativisztikus* "részecskékből" áll (azaz $E = \hbar\omega = pc = \hbar kc$), a körfrekvencia és a hullámszám közti $\omega(\mathbf{k})$ összefüggés, az ún. *diszperziós reláció* a következőképpen írható:

$$\omega(\mathbf{k}) = ck.$$

Ezért a

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} &= -\omega^2 \Psi, \\ \Delta \Psi &= -k^2 \Psi,\end{aligned}$$

összefüggéseket behelyettesítve a diszperziós relációba a következő egyenletet kapjuk:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \Delta \Psi,$$

amely a jól ismert hullámgörbét.

Nemrelativisztikus részecskék alkotta anyagra az $E = \hbar\omega = \frac{p^2}{2m} + V$ összefüggés miatt a diszperziós reláció ($V = \text{állandó}$)

$$\omega(\mathbf{k}) = \frac{\hbar}{2m} k^2 + \frac{1}{\hbar} V$$

és ezért a

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -i\omega \Psi, \\ \Delta \Psi &= -k^2 \Psi,\end{aligned}$$

összefüggések miatt a keresett hullámgörbe a következőképpen írható:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V\Psi. \quad (13)$$

Ez az **időtől függő Schrödinger egyenlet**, vagy más néven: az **állapotegyenlet**, amelynek fennállását Schrödinger *tetszőleges* $V(\mathbf{r}, t)$ potenciál esetére posztulálta.

A $\Psi(\mathbf{r}, t)$ **hullámfüggvény** (állapotfüggvény) a szóbanforgó mikrorészecske(rendszer) térbeli jellemzésére szolgál, és *valószínűségi amplitúdó*ként interpretáljuk. Eszerint annak valószínűsége, hogy a rendszer az $\mathbf{r}$ körüli dv intervallumban található: $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dv$. Mivel a rendszer a térben valahol

biztosan megtalálható, a hullámfüggvény abszolút érték négyzetének a teljes térre vett integrálja egységnyi értéket kell felvegyen,

$$\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dv = 1.$$

Azt mondjuk, hogy a hullámfüggvény *normálható*.

Jóllehet a Schrödinger egyenlet formális analógiára épült posztulátum, mégis, a felfedezése óta eltelt több mint fél évszázad tudományos tapasztalata bebizonyította, hogy az időtől függő Schrödinger egyenlet az anyagi világ alapvető axiómája. Pontosan írja le a nemrelativisztikus, sok részecskéből álló mikrorendszerek (atomok, molekulák, atommagok, szilárd testek) állapotát, és egyben magába foglalja a makroszkopikus világban érvényes Newton-i egyenleteket is. Az időtől függő Schrödinger egyenlet a mikroszkopikus anyagi világ olyan alapvető mozgásegyenlete, amelyből – elvben – a mikroobjektum minden lényeges fizikai tulajdonsága kiszámolható, meghatározható. 1926-ban történt felfedezése óta számítjuk a kvantummechanika születését.

2.1.2. AZ IDŐTŐL FÜGGETLEN (STACIONÁRIUS) SCHRÖDINGER EGYENLET

Konzervatív erőter $[V \neq V(t)]$ esetén megkísérelhetjük a Ψ hullámfüggvényt változóiban szeparált alakban felírni:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \cdot \Theta(t).$$

Ezt (13)-ba helyettesítve, átrendezéssel olyan egyenletet kapunk, amely egyik oldalán csupán t -től, másik oldalán csupán $\mathbf{r}$ -től függő mennyiségek állnak:

$$i\hbar \frac{1}{\Theta} \frac{d\Theta}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \Delta\psi + V(\mathbf{r}) = E.$$

Ez természetesen csak úgy lehetséges, ha a bal- és a jobboldal egy idő- és térváltozótól független állandó, amelyet E -vel jelöltünk.

Így tehát két egyenletet kaptunk az állapotfüggvény idő- és térbeli viselkedésének meghatározására:

$$\frac{d}{dt}\Theta = -i\hbar^{-1}E\Theta,$$

amely megoldását azonnal felírhatjuk:

$$\Theta = \exp[-iEt/\hbar] = \exp[-i\omega t];$$

a másik egyenlet a hullámfüggvény térszerű részét határozza meg,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + V(\mathbf{r})\psi = E\psi, \quad (14)$$

a megfelelő *határfeltételekkel* kiegészítve.

Ez utóbbi egyenlet az **időtől független Schrödinger egyenlet**, más néven: **stacionárius Schrödinger egyenlet**, vagy röviden: **Schrödinger egyenlet**.

A teljes megoldás a

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

alakban írható.

A valószínűségi interpretáció következményeként a hullámfüggvény a normálhatóságon kívül további, ún. *regularitási feltételeket* kell kielégítsen:

i) ψ folytonos függvény kell legyen;

ii) ψ egyértékű kell legyen;

iii) ψ véges értékű kell legyen (ez a normálhatósággal kapcsolatos feltétel).

A felsorolt feltételeknek eleget tevő függvényeket *reguláris függvényeknek* nevezzük.

A fent megfogalmazott regularitási feltételek általában a (14) Schrödinger egyenletben szereplő E konstansnak csak bizonyos értékei mellett teljesülnek. Maga az E konstans energia dimenziójú mennyiség s így kézenfekvő a rendszer energiájával azonosítani. (Konkrét számítási eredményeknek a kísérletileg mért összenergia értékekkel való összehasonlítása bebizonyította, hogy ez így is van.) A regularitási feltételek által megszabott különböző $E_1, E_2, \dots$ értékek a mikrorendszer lehetséges (kvantált) energia értékeit jelentik, a hozzájuk tartozó $\psi_1, \psi_2, \dots$ megoldások pedig a mikrorendszer állapotát jelölik. A (14) egyenlet a matematikában jól ismert sajátérték egyenletnek felel meg; az E_n mennyiségeket a *sajátértékeknek*, a ψ_n megoldásokat pedig *sajátfüggvényeknek* nevezzük.

A Schrödinger egyenlet jelentősége felbecsülhetetlen. Egész iparágak alapultak olyan mikroszkopikus objektumokra, mikrorendszerekre, amelyek fizikai tulajdonságait a (14) egyenlet segítségével lehet feltárni. Így pl. a szilárd testek belső szerkezete, a vékonyrétegek, a félvezetők tulajdonságai, stb. a Schrödinger egyenlet megoldása révén tanulmányozhatók. Ezen objektumok képezik az alapját többek közt a modern híradástechnika-iparnak, vagy a számítógép-iparnak. A vegyipar, a gyógyszergyártás, az atomenergiatermelés inherens alapját olyan mikrorendszerek (atomok, molekulák, vegyületek és atommagok) képezik, amelyek tulajdonságait kizárólag a Schrödinger egyenlet segítségével ismerhetjük meg egzaktul.

2.2 AZ ÁLLAPOTEGYENLETBŐL FAKADÓ NÉHÁNY TULAJDONSÁG.

2.2.1. KÜLÖNBÖZŐ SAJÁTÉRTÉKEKHEZ TARTOZÓ SAJÁTFÜGGVÉNYEK ORTOGONÁLISAK EGYMÁSRA.

Bizonyítás: tegyük fel, hogy $E_k \neq E_l$ és $V = V^*$. Írjuk fel a k -adik és l -edik sajátértékre vonatkozó Schrödinger egyenletet, s az utóbbinak rögtön vegyük a komplex konjugáltját:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_k^* + V(\mathbf{r})\psi_k^* = E_k^*\psi_k^*,$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_l^* + V(\mathbf{r})\psi_l^* = E_l\psi_l^*.$$

Szorozzuk be balról az első egyenletet ψ_l^* -gal, a másodikat ψ_k -val, integráljuk az így kapott egyenleteket a teljes térre, majd vonjuk ki az alsóból a fölsőt. A következő összefüggést kapjuk:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int[\psi_k\Delta\psi_l^* - \psi_l^*\Delta\psi_k]dv = (E_l - E_k)\int\psi_l^*\psi_k dv.$$

A baloldali szögletes zárójelben álló kifejezést az ismert $a\Delta b - b\Delta a = \operatorname{div}[a\operatorname{grad} b - b\operatorname{grad} a]$ differenciálgeometriai tétel segítségével teljes divergenciává alakítjuk át, majd a térfogati integrált a $\int \operatorname{div}\mathbf{A} dv = \int_{\mathcal{F}} \mathbf{A} d\mathbf{f}$ Gauss-Ostogradskij tétel segítségével felületi integrállá:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{\mathcal{F}}(\psi_k\operatorname{grad}\psi_l^* - \psi_l^*\operatorname{grad}\psi_k)d\mathbf{f} = (E_l - E_k)\int\psi_l^*\psi_k dv.$$

A baloldal zérus, mivel $\psi \rightarrow \frac{1}{r}$ legalább, amint $r \rightarrow \infty$. (Ez a normálhatóság miatt van; fogjuk azonban látni, hogy ψ általában exponenciálisan tűnik el a végtelenben, ahol az $\mathcal{F}$ felületet fel kell venni). Így, mivel a jobboldali zárójel kiinduló feltevésünk értelmében nem zérus, maga az integrál kell zérus legyen. *Q.E.D.*

A normált sajátfüggvények tehát kielégítik az *ortonormáltsági feltételt*:

$$\int\psi_l^*\psi_k dv = \delta_{lk}.$$

2.2.2. $\psi(r)$ DERIVÁLTJA FOLYTONOS A POTENCIÁL LEGFELJEBB VÉGES SZAKADÁSSAL RENDELKEZŐ HELYÉN

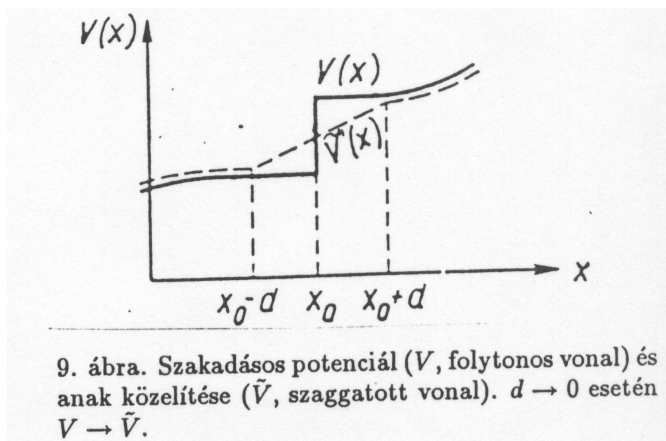
Ahol a potenciálnak nincs szakadása, ott a Schrödinger egyenlet alakjából következően sejteni lehet, hogy igaz a címben megfogalmazott állítás. Nagyobb figyelmet azon térrészek érdemelnek, ahol a potenciálnak szakadása van. Ezek vizsgálata során kapott megállapítások egyben érvényesek lesznek a potenciál folytonos tartományára is. A vizsgálatot elegendő egy dimenzióban elvégezni.

Tekintsünk tehát egy $V(x)$ potenciált, amelynek véges szakadása van az $x = x_0$ pontban. (Lásd 9. ábra.) A hullámfüggvényre vonatkozó folytonossági követelményből írhatjuk:

$$\psi(x_0 - 0) = \psi(x_0 + 0).$$

Állítás:

$$\psi'(x_0 - 0) = \psi'(x_0 + 0),$$



azaz ψ' is folytonos a potenciál (véges) szakadási helyén.

Bizonyítás: felírjuk a Schrödinger egyenletet egy, az ábrán szaggatott vonallal jelölt, olyan közelítő $\tilde{V}$ potenciálra, amely folytonosan interpolál át a V eredeti potenciál x_0 -nál levő (véges) szakadási helyén:

$$\tilde{\psi}''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - \tilde{V}(x)] \tilde{\psi}(x) = 0.$$

Könnyen belátható, hogy $\tilde{\psi} \rightarrow \psi$, miközben $d \rightarrow 0$, ugyanis ekkor $\tilde{V} \rightarrow V$ (ld. az ábrát). Ugyanakkor

$$\int_{x_0-d}^{x_0+d} dx \tilde{\psi}''(x) = \tilde{\psi}'(x_0+d) - \tilde{\psi}'(x_0-d) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0-d}^{x_0+d} dx [\tilde{V}(x) - E] \tilde{\psi}(x).$$

Az utolsó integrál zérushoz tart miközben $d \rightarrow 0$, mivel az integrandus korlátos, viszont az integrálás intervalluma közelíti a nulla mértékű halmazt. Ebből következik, hogy

$$\psi'(x_0 + 0) = \tilde{\psi}'(x_0 + 0) = \tilde{\psi}'(x_0 - 0) = \psi'(x_0 - 0), \quad Q.E.D.$$

2.2.3. KONTINUITÁSI EGYENLET.

Tekintsük az

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi - V\Psi = 0$$

állapotegyenletet, és vegyük a komplex konjugáltját:

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi^* - V\Psi^* = 0.$$

(Feltételeztük, mint korábban, hogy a potenciál valós.) Szorozzuk be balról a felső egyenletet $-\frac{i}{\hbar}\Psi^*$ -gal, az alsót $\frac{i}{\hbar}\Psi$ -vel, majd adjuk össze a két egyenletet. A következő eredményt kapjuk:

$$\frac{\partial \Psi^* \Psi}{\partial t} + \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \Delta \Psi^* - \Psi^* \Delta \Psi) = 0.$$

A baloldal második tagja teljes divergenciává alakítható a már idézett differenciálgeometriai tétel segítségével, s ezért az egyenlet a hidrodinamika kontinuitási egyenletének formájára hozható:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J} = 0, \quad (15a)$$

ahol bevezettük a

$$\rho = \Psi^* \Psi$$

sűrűséget, valamint a

$$\mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \quad (15b)$$

áramsűrűséget.

Egy kontinuitási egyenlet mindig valamilyen megmaradási tételt fejez ki. Integrálva (15a)-t a $\mathcal{V}$ (teljes) térfogatra, és az első tagban az idő szerinti deriválást az integráláson átemelve, kapjuk:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} dv \rho + \int_{\mathcal{V}} dv \operatorname{div} \mathbf{J} = 0.$$

Az első tagbeli integrál időben állandó (mivel az állapotfüggvény normálható, azaz $\int_{\mathcal{V}} \Psi^* \Psi dv = 1$) így tehát az első tag zérust ad. Azaz zérus kell legyen a második tag is, amelyet a $\mathcal{V}$ térfogatot határoló felület menti integrállá alakítva a Gauss-tétel segítségével, kapjuk:

$$\int_{\mathcal{V}} dv \operatorname{div} \mathbf{J} = \int_{\mathcal{F}} d\mathbf{f} \cdot \mathbf{J} = 0.$$

Ebből leolvasható, hogy (15a) végeredményben a (megtalálási) valószínűség megmaradását fejezi ki, mivel az integrálási térfogatot határoló felületen át időegység alatt ugyanannyi (valószínűségi) áramsűrűség halad befelé, mint kifelé.

Itt jegyezzük meg, hogy az állapotfüggvény a (13) állapotegyenlet linearitása és homogenitása, valamint a normáltsági követelmény miatt egy egységnyi abszolút értékű fázisfaktor erejéig határozatlan: Ψ és $C\Psi$ ugyanazt az állapotot jelenti, amennyiben $|C| = 1$. Ez is azt mutatja, hogy az állapotfüggvény nem közvetlenül mérhető mennyiség. Ennek ellenére, pl. elektromágneses térben az állapotfüggvény (relatív)

fázisának különleges jelentősége lesz, amellyel a későbbiekben az Aharonov-Bohm effektus kapcsán majd találkozunk.

2.2.4. EHRENFEST TÉTELE.

Ehrenfest tétele kapcsolatot teremt a klasszikus mechanikai tömegpont fogalom és a kvantummechanikai valószínűség-hullám kép között.

Egy $\Psi(\mathbf{r}, t)$ hullámfüggvénnyel leírt elektron nem lokalizálható egy pontra, viszont bevezethető a *tömegközéppont* fogalma a következő definícióval:

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \Psi^* \mathbf{r} \Psi dv$$

A tömegközéppont x -irányú összetevője tetszőleges erőter esetén a következőképpen számolható:

$$\langle x \rangle = \int \Psi^* x \Psi dv = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \Psi^*(x, y, z, t) x \Psi(x, y, z, t).$$

Határozzuk meg a tömegközéppont *sebességének* várható értékét! Idő szerint parciálisan deriválva kapjuk:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \langle \dot{x} \rangle = \int \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} x \Psi + \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dv.$$

Felhasználva a (13) állapotegyenletet,

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = +\frac{i\hbar}{2m} \Delta \Psi - \frac{i}{\hbar} V \Psi,$$

és komplex konjugált párját,

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \Delta \Psi^* + \frac{i}{\hbar} V \Psi^*,$$

írhatjuk tovább

$$\langle \dot{x} \rangle = \frac{i\hbar}{2m} \int [-(\Delta \Psi^*) x \Psi + \Psi^* x \Delta \Psi] dv.$$

Mármost kihasználva az

$$x \Delta \Psi = \Delta (x \Psi) - 2 \frac{\partial \Psi}{\partial x}$$

azonosságot, kapjuk:

$$\langle \dot{x} \rangle = -\frac{i\hbar}{2m} \int \left[\Delta \Psi^* (x \Psi) - \Psi^* \Delta (x \Psi) + 2 \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] dv.$$

A szögletes zárójelben álló első két tag zérust ad, mivel

$$\Delta \Psi^* (x \Psi) - \Psi^* \Delta (x \Psi) = \text{div}[\text{grad} \Psi^* \cdot (x \Psi) - \Psi^* \text{grad}(x \Psi)],$$

és e teljes divergenciára vonatkozó térfogati integrál a Gauss-tétel segítségével átalakítható felületi integrállá, amely Ψ eltűnése miatt zérust ad. Ezért

$$\langle \dot{x} \rangle = -\frac{i\hbar}{m} \int \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi dv = \frac{1}{m} \left\langle \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right\rangle.$$

Számítsuk most ki a tömegközéppont x -komponensének gyorsulását! Felhasználva az állapotegyenletet,

$$\begin{aligned}\langle \ddot{x} \rangle &= -\frac{i\hbar}{m} \int \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dv \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m^2} \int \left(\Delta \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \Delta \Psi \right) dv + \int \frac{1}{m} V \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dv - \int \frac{1}{m} \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} (V \Psi) dv \\ &= -\frac{1}{m} \int \Psi^* \Psi \frac{\partial V}{\partial x} dv.\end{aligned}$$

Azaz

$$m \langle \ddot{x} \rangle = \int \Psi^* \left(-\frac{\partial}{\partial x} V \right) \Psi dv = \langle F_x \rangle.$$

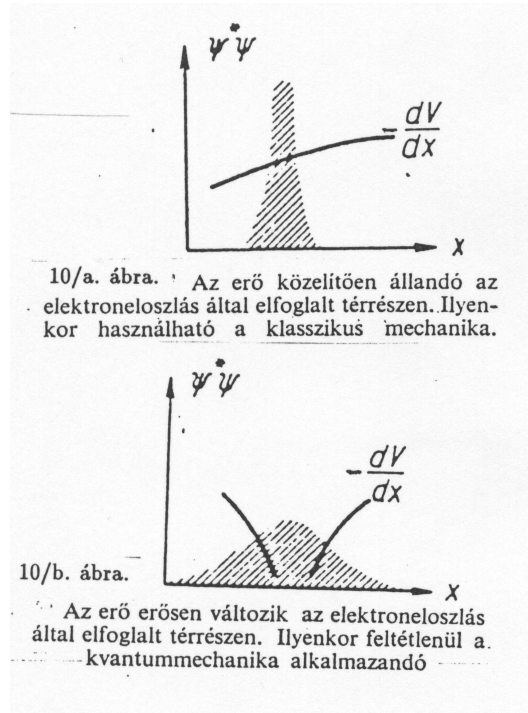
Vektoriális alakba írva kapjuk Ehrenfest tételének matematikai alakját:

$$m \langle \ddot{\mathbf{r}} \rangle = \int \Psi^* (-\text{grad } V) \Psi dv = \langle \mathbf{F} \rangle \quad (16)$$

Kimondhatjuk tehát, hogy az elektron (vagy más vizsgált részecske) tömegközéppontja úgy mozog, hogy gyorsulásának a részecske tömegével való szorzata a részecskére ható erő középértékével (sűrűség szerinti átlagával) egyenlő.

Egy katódsugárcsőben $\text{grad } V$ majdnem állandó abban a térrészben (ld. a 10/a ábrát), ahol az elektron tartózkodik (azaz a Ψ zérustól különbözik). Ezért itt érvényes Newton mozgásegyenlete: $m \langle \ddot{x} \rangle = F|_{x=x_0}$. (Figyelembe vettük Ψ normálhatóságát.)

Egy atom esetén viszont V erősen változik abban a térrészben (az atom belsejében, ld. a 10/b ábrát), ahol a $\Psi \neq 0$, így az előbbi egyszerűsítés [a kiemelés] (16)-ban nem hajtható végre, a Newton egyenlet nem alkalmazható. Az elektronok mozgását az atomban (az atomok, szilárdtestek stb. szerkezetét) a Schrödinger egyenlet írja le helyesen.



2.3 A SCHRÖDINGER EGYENLET MEGOLDÁSA NÉHÁNY EGYSZERŰ PROBLÉMÁRA

2.3.1. RÉSZECSCKE EGYDIMENZIÓS POTENCIÁLDOBOZBAN.

Tekintsünk egy mindkét oldalán lezárt vízszintes csövet, amelyben egy m tömegű részecske (pl. golyó, vagy elektron) súrlódásmentesen mozoghat. A részecske potenciális energiája a csőben nulla, az áthatolhatatlan oldalfalak pedig végtelen potenciális energiafalat jelentenek számára. Az ilyen idealizált rendszer számára a potenciálfüggvény az ábrán látható dobozhoz hasonló alakkal rendelkezik és ezért ezt a modellt egydimenziós potenciáldoboz modellnek nevezzük. A potenciált tehát a következő alakban írhatjuk fel (11/a ábra):

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha } 0 \leq x \leq L, \\ \infty & \text{máskülönben.} \end{cases}$$

Írjuk fel a (14) alatti Schrödinger egyenletet a problémára (azaz, az m tömegű részecskének

a fenti egydimenziós potenciálban való mozgásának, ill. lehetséges állapotainak leírására):

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

a megfelelő két határfeltétellel, amelyek most a folytonosság követelménye szerint a következőképpen írhatók:

$$\psi(0) = \psi(L) = 0.$$

Bevezetve a $k = \sqrt{2mE/\hbar^2} \geq 0$ hullámszám mennyiséget, a Schrödinger egyenlet a következő egyszerű formában írható:

$$\psi''(x) = -k^2\psi(x), \quad 0 \leq x \leq L$$

amelynek megoldása

$$\psi(x) = A \cos kx + B \sin kx$$

két (integrációs) állandót tartalmaz. Kihasználva az origóbeli folytonosságot, kapjuk:

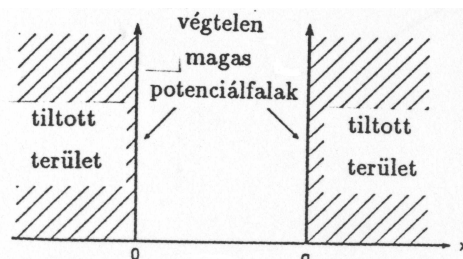
$$\psi(0) = 0 \rightarrow A = 0, \quad \rightarrow \psi(x) = B \sin kx.$$

Az $x = L$ -beli folytonosság ezért csak úgy biztosítható, ha

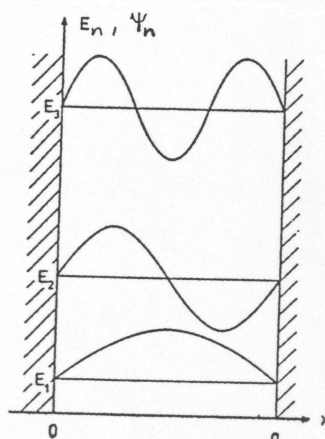
$$B \sin kL = 0 \rightarrow kL = n\pi, \quad n = 1, 2, \dots$$

azaz az energiával kapcsolatos k hullámszám nem vehet fel tetszőleges értéket, hanem csak k_n lehet:

$$k_n = n \frac{\pi}{L} \rightarrow E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \equiv E_1 n^2.$$



11/a. ábra. Egydimenziós potenciáldoboz.



11/b. ábra. Az egydimenziós potenciáldobozban kialakuló E_n energiaszintek és ψ_n állapotok. ($n = 1, 2, 3, \dots$).

Azt kaptuk, hogy az energia csak E_1 egész-számú többszöröse lehet. Az $n + 1$ kvantumszámmal jellemzett nívóról az n -dik nívóra történő átmenet esetén a felszabaduló energia

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = (2n + 1)E_1.$$

Mármint, amennyiben a szóbanforgó test makroszkópikus tömeggel rendelkezik, pl. $m = 10^{-3}$ [kg], és a potenciáldoboznak (csőnek) is makroszkópikus mérete van, pl. $L = 10^{-2}$ [m], akkor $E_1 \approx 4.4 \times 10^{-60}$ [J]. Az energiának ilyen kis adagokban történő változása természetesen mérhetetlen és a megfigyelő számára folytonosnak tűnik. Atomi méretek esetén azonban a kvantáltság már feltűnő, és figyelembe veendő. Tekintsünk ui. egy elektront ($m = 9 \times 10^{-31}$ [kg]) egy atomi méretű potenciáldobozban ($L = 10^{-9}$ [m]). Ekkor $E_1 = 2 \times 10^{-19}$ [J] = 1,3 [eV]. Elektronvoltnyi energia megváltozásokat viszont (elektronok esetén) már könnyen lehet mérni, s ezáltal észlelni a bezárt elektron energiaállapotainak kvantált voltát.

A kapott eredményt más szempontból is megvizsgálhatjuk. Kérdezhetjük ui. azt, hogy milyen magas E_n energianívóra kell gerjeszteni egy potenciáldobozba zárt tömeget ahhoz, hogy észlelhető (mérhető) energiaváltozás történjen. A $\Delta E = E_n - E_1 = (n^2 - 1)E_1$ képletből kiderül, hogy makroszkópikus méretek esetén (1 [erg] = 10^{-7} [J]) energia jó pontossággal mérhető $n \approx 10^{27}$, míg mikroszkópikus objektumok esetén (elektronvolt mérhető) a korábbi összefüggés alapján látjuk, hogy már kis kvantumszámok ($n = 2, 3, \dots$) is szerephez jutnak. (A kvantumosság "kézzelfogható").

Első kvantummechanikai eredményünk kapcsán további megállapításokat is tehetünk.

1) A vizsgált rendszernek nincs zérus energiájú állapota. Mivel a potenciális energia zérus, a teljes energia tisztán kinetikus (mozgási) energiából tevődik össze. A rendszer természetes állapota a mozgás. ($n = 0$ kvantumszám kizárandó, mivel ez $\psi \equiv 0$ megoldást jelentené, ami viszont azt jelentené, hogy nincs részecske a megengedett térintervallumban.)

2) A $k_n L = n\pi$ képletből következik, hogy $L = \frac{n\pi}{k_n} = n \frac{\lambda_n}{2}$ ($\lambda_n = \frac{2\pi}{k_n}$ a de Broglie hullámhossz), azaz a részecske számára rendelkezésre álló intervallum a részecske de Broglie félhullámhosszának egész számú többszöröse. (Ld. a 11.b ábrát, és vö. a Bohr posztulátummal kapcsolatos megállapításokkal.)

Jóllehet a Schrödinger egyenlet által szolgáltatott energiaállapotokat eléggé részletesen elemeztük, a probléma teljes megoldását még nem végeztük el. Hátra van még a hullámfüggvény meghatározása, ill. a benne szereplő B konstans rögzítése. Ezt a normáltsági tulajdonság felhasználásával tudjuk meghatározni:

$$1 = \int |\psi_n|^2 dv = \int_0^L B^2 \sin^2 k_n x dx \rightarrow B = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Tehát a potenciáldobozba zárt részecske hullámfüggvénye és lehetséges energiakészlete (azaz az egydimenziós potenciáldoboz probléma teljes megoldása) a következő (11/b ábra):

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_n x, \quad \text{ahol} \quad k_n = \frac{\pi}{L} n, \quad (17a)$$

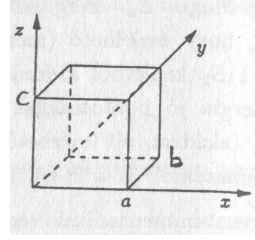
$$E_n = E_1 n^2, \quad \left(E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \right), \quad n = 1, 2, 3, \dots, \infty \quad (17b)$$

2.3.2. RÉSZECSCKE TÉRBELI POTENCIÁLDOBOZBAN.

A fenti egydimenziós problémát könnyen kiterjeszthetjük három dimenzióra. Legyen a potenciál ui. a következő:

$$V(x, y, z) = 0, \quad \text{ha} \quad \begin{cases} 0 \leq x \leq a, \\ 0 \leq y \leq b, \\ 0 \leq z \leq c, \end{cases}$$

$$V(x, y, z) = \infty \quad \text{máskülönben.}$$



A (14)-es Schrödinger egyenlet a fenti problémára nézve a következőképpen írható:

$$-\Delta\psi = \frac{2mE}{\hbar^2}\psi.$$

A hullámfüggvényre vonatkozó határfeltétel természetesen most

$$\psi(0, 0, 0) = \psi(0, y, z) = \psi(x, 0, z) = \psi(x, y, 0) = \psi(a, y, z) = \psi(x, b, z) = \psi(x, y, c) = 0.$$

A megoldást kíséreljük meg változók szerinti szeparálással megkapni, azaz tegyük fel, hogy a hullámfüggvény előállítható a

$$\psi(x, y, z) = f(x)g(y)h(z)$$

szorzat alakban. Ezt beírva a fenti Schrödinger egyenletbe, ψ -vel való osztás után kapjuk:

$$-\frac{1}{f} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - \frac{1}{g} \frac{\partial^2 g}{\partial y^2} - \frac{1}{h} \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

A baloldal első tagja csak az x változótól függ, a második csak az y -től, a harmadik pedig csak z -től, a jobboldal pedig állandó. Mindez csak úgy lehetséges, ha a baloldal minden tagja külön-külön is állandó. Jelöljük ezeket az állandókat rendre k_x^2 , k_y^2 , k_z^2 -tel. Ekkor egyenletünk egyrészt a következő definícióra redukálódik,

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{2mE}{\hbar^2},$$

azaz a teljes energia a három szabadsági foknak megfelelő (hullám)mozgásból tevődik össze. Másrészt három, az előző fejezetben részletesen tárgyalt egydimenziós Schrödinger egyenletet kapunk, amelyekből most csak az x -irányút írjuk ki:

$$-\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} = k_x^2 f(x), \quad 0 \leq x \leq a.$$

Ennek megoldását azonnal felírhatjuk az előző fejezet alapján úgy, mint

$$f(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin k_x x, \quad \text{ahol} \quad k_x = \frac{\pi}{a} n_x, \quad n_x = 1, 2, \dots$$

A teljes probléma megoldása tehát:

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{b} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{c} z\right) \quad (18a)$$

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right), \quad (18b)$$

ahol $n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots, \infty$. Legalacsonyabb energiaállapot $n_x = n_y = n_z = 1$ esetén valósul meg.

Amennyiben a doboz minden oldala egyenlő ($a = b = c = L$), a legalacsonyabb energiaállapot értéke

$$E_1 \equiv E_{111} = 3 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}.$$

A következő energiaállapot már háromféleképpen valósulhat meg:

$$E_2 = E_{211} = E_{121} = E_{112} = 6 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2},$$

amelyhez tartozó hullámfüggvények viszont természetesen különbözőek:

$$\psi_{211} \neq \psi_{121} \neq \psi_{112}.$$

Különböző sajátfüggvényekhez tartozó azonos energia sajátértékeket *elfajult*, vagy *degenerált* sajátértékeknek nevezzük. Az E_2 energiaállapot *degenerációs foka* három.

2.3.3. LINEÁRIS HARMONIKUS OSZCILLÁTOR.

A **klasszikus fizikából** tudjuk, hogy lineáris harmonikus rezgőmozgást azok a testek végeznek, amelyekre az x kitéréssel arányos, de azzal ellentétes irányú erő hat.

$$F = -Dx = -\text{grad}V \rightarrow V(x) = \frac{1}{2}Dx^2.$$

Itt D jelöli az ún. *direkciós erőt*, $V(x)$ pedig a részecske potenciális energiája. (Lásd az ábrát.)

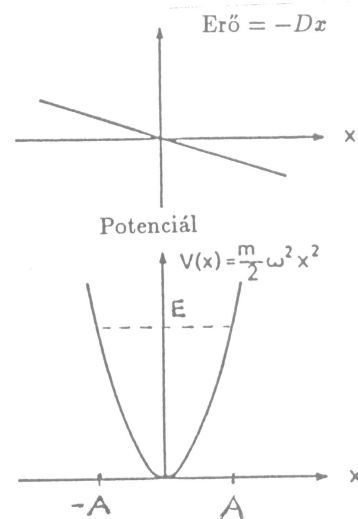
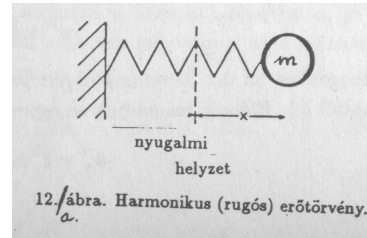
Newton II. törvényét használva felírjuk a részecske mozgásegyenletét és megoldását

$$F = -Dx = m\ddot{x} \rightarrow x(t) = A \sin \sqrt{\frac{D}{m}}(t - t_0),$$

amely két integrációs állandót tartalmaz (a mozgás A maximális amplitudóját és t_0 kezdő időpillanatát, amelyet nullának veszünk). A továbbiakban használni fogjuk a

$$\sqrt{\frac{D}{m}} = \frac{2\pi}{\tau} = 2\pi\nu = \omega$$

összefüggésekkel bevezetett τ = periódus idő, ν = frekvencia, és ω = körfrekvencia (v. szögsebesség) mennyiségeket. A direkciós erő a körfrekvencia és a tömeg függvénye: $D = m\omega^2$.



Mármost – viszonyítási alapként – érdemes áttekinteni a klasszikus fizikában tanult energiaviszonyokat (ld. az ábrát is):

$$\text{potenciál : } V = \frac{1}{2}Dx^2(t) = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 \sin^2 \omega t.$$

$$\text{kin.energia : } T = \frac{1}{2}m\dot{x}^2(t) = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 \cos^2 \omega t.$$

$$\text{tot.energia : } E = T + V = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 = \text{konstans}.$$

A harmonikus rezgőmozgást végző test teljes energiája állandó (energiamegmaradás), és csakis a maximális kitéréstől függ (ω -t az erőtvény és a tömeg rögzíti). A maximális kitérés viszont tetszőleges lehet, így a teljes energia is tetszőleges értéket vehet fel, *folytonosan* változhat.

A **kvantummechanikai** tárgyalás szerint ezzel szemben látni fogjuk, hogy a részecske energiája most sem lehet tetszőleges, hanem csak bizonyos értékeket vehet fel, csak adagokban, kvantumokban változhat. Tekintsük a lineáris harmonikus oszcillátor problémára vonatkozó Schrödinger egyenletet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x).$$

Bevezetve a

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \quad \eta = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

jelöléseket, a Schrödinger egyenlet a következő alakban írható:

$$\psi'' + (\eta - \xi^2)\psi = 0.$$

A megoldást az ún. *Sommerfeld-féle polinom módszerrel* fogjuk előállítani, amely két lépésből áll. Először megoldjuk az egyenletet $\xi \rightarrow \pm\infty$ határesetben:

$$\psi_a'' = \xi^2 \psi_a \rightarrow \psi_a = e^{-\xi^2/2}.$$

(Visszahelyettesítéssel meggyőződhetünk róla, hogy $\xi \rightarrow \pm\infty$ határesetben a ψ_a megoldás kielégíti a differenciálegyenletet.)

Második lépésként az általános megoldást ezen aszimptotikus megoldás és egy polinom szorzataként keressük:

$$\psi = u(\xi)e^{-\xi^2/2}, \quad u(\xi) = \sum_{r=0}^{\infty} c_r \xi^r$$

E feltételezett megoldásnak a Schrödinger egyenletbe való helyettesítése és $e^{-\xi^2/2}$ -vel történő egyszerűsítés után az

$$u'' - 2\xi u' + (\eta - 1)u = 0$$

egyenletet kapjuk az $u(\xi)$ polinom meghatározására. Így szükségünk lesz az $u(\xi)$ polinom első és második deriváltjára:

$$u' = \sum_{r=1}^{\infty} r c_r \xi^{r-1} = \sum_{r=0}^{\infty} r c_r \xi^{r-1},$$

$$u'' = \sum_{r=2}^{\infty} r(r-1)c_r \xi^{r-2} = \sum_{r=0}^{\infty} (r+2)(r+1)c_{r+2} \xi^r.$$

Behelyettesítés után kapjuk:

$$\sum_{r=0}^{\infty} \{(r+2)(r+1)c_{r+2} - 2rc_r + (\eta-1)c_r\} \xi^r = 0.$$

Ez az egyenlet csak akkor teljesülhet, ha a kapcsos zárójelben álló kifejezés r minden értékére zérus, amelyből egy rekurziós összefüggést kapunk az ismeretlen polinom együtthatóinak kiszámítására:

$$c_{r+2} = \frac{2r+1-\eta}{(r+1)(r+2)} c_r.$$

Vizsgáljuk meg, hogy e rekurziós összefüggés r nagy értékeire (azaz ξ magas hatványaira) milyen függvény hatványsorát állítja elő!

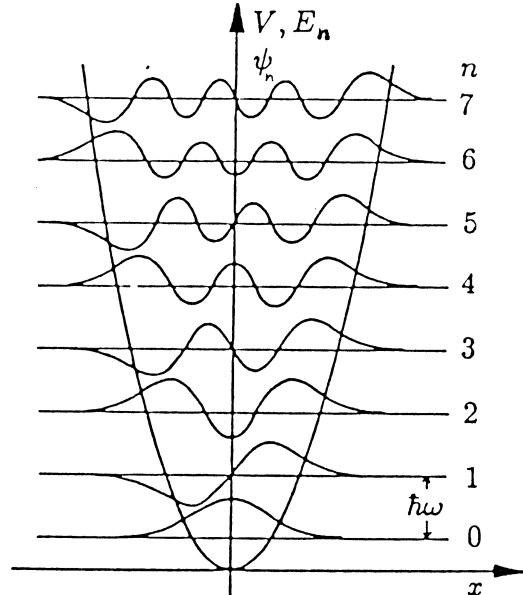
$$r \rightarrow \infty \quad c_{r+2} \sim \frac{2}{r} c_r,$$

ez viszont az e^{ξ^2} függvény hatványsorára jellemző rekurzió. Amennyiben tehát az $u(\xi)$ polinom hatványsora végtelen számú tagot tartalmazna, a teljes megoldás nem lenne reguláris. ($\psi \rightarrow e^{\xi^2/2}$ lenne $\xi \rightarrow \infty$ esetén.) Így a polinom szükségképpen véges fokszámú kell legyen. Azaz, kell létezzen egy maximális n fokszám, amelyre $c_n \neq 0$, viszont az összes többi $c_{n+2} = c_{n+4} = \dots = 0$. Ez csak úgy lehetséges, ha a rekurziós formula számlálója $r = n$ esetén zérussá válik, azaz

$$2n+1 = \eta \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} \rightarrow E \equiv E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (19a)$$

Azt az ismerős eredményt kaptuk, hogy a harmonikus oszcillátor potenciálban mozgó részecske teljes energiája a kvantummechanika szerint nem lehet tetszőleges, hanem csak bizonyos, az n kvantumszámokkal jellemzett értékeket vehet fel. Ezért az energia változása sem lehet folytonos, hanem csak $\hbar\omega$ adagok (kvantumok) többszöröseként történhet. Ezen kívül azt a (szintén ismerős) jelenséget vehetjük észre a fenti képletben, hogy a legmélyebb energiaszint nem zérus, azaz a harmonikus oszcillátor potenciálban nem alakul ki abszolút nyugalom, a részecske még alapállapotban is rendelkezik (ún. *zérusponti*) energiával.

A lineáris harmonikus oszcillátor probléma teljes hullámfüggvénye az eddigiek alapján a következőképpen írható:



13. ábra. Az egydimenziós harmonikus oszcillátor potenciálban kialakuló E_n energiaszintek és ψ_n állapotok. ($n = 0, 1, 2, \dots$).

$$\psi_n(x) = e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} u_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (19b)$$

ahol $u_n(\xi)$ a fenti rekurziós formulából előállítható ún. Hermite-féle (az $e^{-\xi^2}$ súlyfüggvényre nézve ortogonális és normált) polinomokkal arányos, melynek első néhány tagja a következő ($N_n^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}/2^n n!$):

$$u_0(\xi) = N_0,$$

$$u_1(\xi) = N_1 2\xi,$$

$$u_2(\xi) = N_2 2(2\xi^2 - 1).$$

A kétatomos molekulák rezgési (vibrációs) színeképét harmonikus erők jelenlétével magyarázhatjuk meg. A fenti energiaképlet alapján ugyanis az n -dik energiaszintről az $n - 1$ -edikre való legerjesztődés esetén a molekula

$$h\nu = E_n - E_{n-1} = \hbar\omega$$

energiájú és $\nu = \frac{1}{2\pi}\omega$ frekvenciájú fotont sugároz ki. A színekép egymástól ugyancsak $\Delta\nu = \frac{1}{2\pi}\omega = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{D}{m}}$ távolságra levő vonalakból áll, s ez teljes mértékben megegyezik a tapasztalattal. A fenti megfontolásból következtetést vonhatunk le a molekulák atomjai között ható harmonikus erő (a D direkciós erő) nagyságára is, amennyiben ismerjük tömegüket. Sósav (HCl) esetén pl. a kísérleti tapasztalatok szerint $\nu = 8.65 \times 10^{13}$ [s⁻¹] (ami ~ 0.3 eV energiájú és $\lambda \sim 35000$ Å hullámhosszal rendelkező fotonnak felel meg) s ebből, valamint a más mérésekből ismert (redukált) tömeg felhasználásával $D = 0.48$ [N/cm] nagyságúnak adódik.

Izotóp effektus. (A zérusponti energia kísérleti bizonyítéka.)

Tekintsünk egy kétatomos molekulát, pl. a $^{11}\text{B}-^{16}\text{O}$ molekulát. A molekula teljes energiája (mint később fogjuk látni) lényegében az elektronok molekulákon belüli E_A elrendeződési (konfigurációs) energiájából, valamint a vibrációs energiából tevődik össze (m =redukált tömeg):

$$E(A, n) = E_A + \hbar\sqrt{\frac{D_A}{m}}\left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Ha mindkettő változik az átmenet során, akkor a kisugárzott fény ν_{12} frekvenciáját az

$$\omega_{12} = 2\pi\nu_{12} = \frac{E_A - E_B}{\hbar} + \sqrt{\frac{D_A}{m}}\left(n_1 + \frac{1}{2}\right) - \sqrt{\frac{D_B}{m}}\left(n_2 + \frac{1}{2}\right)$$

képlet szolgáltatja. Itt E_A, E_B, D_A és D_B kizárólag a molekulák elektronállapotai által meghatározott konstansok. Ezért tehát, ha a molekulában levő egyik elemet helyettesítjük az egyik *izotópjával*, akkor e konstansok változatlanok maradnak, csak a molekula (redukált) m tömege változik meg m^* -ra. Helyettesítsük pl. ^{11}B -t a ^{10}B -ral. Ekkor az átmenethez tartozó frekvencia is megváltozik ν^* -ra:

$$2\pi\nu_{12}^* = \frac{E_A - E_B}{\hbar} + \sqrt{\frac{D_A}{m^*}}\left(n_1 + \frac{1}{2}\right) - \sqrt{\frac{D_B}{m^*}}\left(n_2 + \frac{1}{2}\right),$$

azaz az átmenethez tartozó frekvenciában kismértékű eltérést észlelünk (ezt nevezzük *izotóp effektusnak*):

$$\nu_{12} - \nu_{12}^* = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{1}{\sqrt{m^*}} \right) \left(\sqrt{D_A}\left(n_1 + \frac{1}{2}\right) - \sqrt{D_B}\left(n_2 + \frac{1}{2}\right) \right).$$

Abban az esetben, amikor az n_1 és n_2 vibrációs szintek az alapállapotnak felelnek meg (az ún. "null-null" átmenet esetén), az izotóp effektus:

$$\nu_{00} - \nu_{00}^* = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{1}{\sqrt{m^*}} \right) (\sqrt{D_A} - \sqrt{D_B}) \neq 0.$$

Ez a képlet teljes összhangban van a tapasztalattal. Amennyiben a zérusponthoz tartó energiát a vibrációs energiaképletből elhagynánk, nem kapnánk izotóp effektust $0 - 0$ átmenet esetén.

3. A KVANTUMMECHANIKA MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI ALAPJAI

Az előző fejezetben már láttuk, hogy Schrödinger hullámegyenlete képes a mikrofizikai objektumok energiaállapotaiban jelentkező kvantumos (diszkrét) jelenségeket is magyarázni. Röviden megemlítettük azt is, hogy a stacionárius Schrödinger egyenlet a matematikában már régóta ismert ún. sajátérték egyenletnek felel meg.

A fizikai mennyiségek értékének kvantumos, diszkrét változása ismeretlen volt a klasszikus fizikában, ezért ott a fizikai mennyiségeket folytonos, differenciálható függvényekkel írtuk le. A kisméretű mikroobjektumok vizsgálata megmutatta azonban, hogy a természetben a fizikai mennyiségek egyrészt folytonos, másrészt diszkrét értékkészlettel rendelkeznek, ezért a nekik megfelelő matematikai konstrukcióknak tükrözni kell e fontos tényt.

3.1. OPERÁTOROK ÉS REGULÁRIS FÜGGVÉNYEK

Dirac volt az, aki elsőként ismerte fel teljes általánosságban, hogy a **fizikai mennyiségek** matematikai reprezentánsai nem a klasszikus fizika szokásos függvényei, hanem bizonyos **operátorok**, amelyek a **fizikai állapotot** reprezentáló **reguláris függvények** terén, vagy más néven, a **Hilbert-téren** hatnak. Az a tér, amelyen az $\hat{O}$ operátor hat, az illető operátor $\mathcal{D}_O$ értelmezési tartománya.

Egy f függvény számhoz (x) számot (y) rendel: $y = f(x)$. Példa: $0 = \sin \pi$.

Egy $\hat{O}$ operátor függvényhez (f) függvényt (g) rendel: $g(x) = \hat{O}f(x)$. Példák: $g(x) = \frac{d}{dx}f(x)$, $g(x) = \sqrt{f(x)}$, stb.

Az operátorok a függvényekhez képest az absztrakció magasabb fokát képviselik, ezért nyilván sokkal gazdagabb lehetőséget kínálnak az elméleti leírás számára.

A fizikai mennyiségeket leíró (reprezentáló) **operátorok** nem lehetnek tetszőlegesek.

Az anyagi részecskékhez rendelt valószínűségi hullámok interferenciára való képessége (ld. például Davison-Germer kísérlet) vezetett el a szuperpozíció elv felállításához, amely kimondja, hogy két különböző állapot összege, szuperpozíciója is egy lehetséges állapot (azaz a Schrödinger egyenletnek megoldása). Ahhoz, hogy a *szuperpozíció elve* teljesülhessen, szükséges az, hogy a fizikai mennyiségeket reprezentáló operátorok *lineárisak* legyenek. Egy $\hat{O}$ operátor lineáris, ha a következő tulajdonságokkal rendelkezik ($\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{D}_O$):

$$\hat{O}(\psi_1 + \psi_2) = \hat{O}\psi_1 + \hat{O}\psi_2,$$

és

$$\hat{O}(k\psi_1) = k(\hat{O}\psi_1),$$

ahol k egy tetszőleges (komplex) számot jelent.

Láthatjuk tehát, hogy pl. a négyzetgyök vonás ($\sqrt{\quad}$), vagy az abszolútérték képzés ($|\quad|$) nem jöhet szóba, mint fizikai mennyiséget reprezentáló operátor.

Lineáris operátorok *összegét* a következő összefüggés értelmezi ($\psi \in \mathcal{D}_{O_1}, \mathcal{D}_{O_2}$):

$$(\hat{O}_1 + \hat{O}_2)\psi = \hat{O}_1\psi + \hat{O}_2\psi.$$

Lineáris operátorok *szorzata* pedig az operátorok egymás után való alkalmazását jelenti ($\psi \in \mathcal{D}_{O_2}, O_2\psi \in \mathcal{D}_{O_1}$):

$$\hat{O}_1\hat{O}_2\psi = \hat{O}_1(\hat{O}_2\psi) \equiv \hat{O}_1g, \quad \text{ahol } g = \hat{O}_2\psi.$$

(Így könnyen előfordulhat, hogy $\hat{O}_1\hat{O}_2\psi$ létezik, de $\hat{O}_2\hat{O}_1\psi$ már nem!)

Operátor négyzet az $\hat{O}^2 = \hat{O}\hat{O}$ összefüggést jelenti.

Különösen fontosak az olyan lineáris operátorok, amelyek egy függvényt állandósorozásába viszik át:

$$\hat{O}\psi = k\psi, \quad k = \text{konstans.}$$

Az ilyen egyenletet az operátor *sajátérték egyenletének* nevezzük, ψ -t az operátor *sajátfüggvényének*, k -t pedig a operátor *sajátértékének*. Az $\hat{O}$ operátor összes sajátértékét *spektrumnak* nevezzük.

A Schrödinger egyenlet is egy speciális operátor egyenlet, az energia fizikai mennyiséghez rendelt $\hat{H}$ operátor sajátérték egyenlete:

$$\hat{H}\psi = E\psi.$$

Alkossuk meg az energia $\hat{H}$ operátorát egydimenziós mozgás esetére! Legyen az x irányú *impulzus* fizikai mennyiséghez tartozó operátor

$$\hat{p}_x \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad (20a)$$

azaz az x -szel való deriválás.

Az x irányú *elmozdulás (koordináta)* fizikai mennyiséghez tartozó operátor pedig legyen az x -szel való szorzás

$$\hat{x} \rightarrow x, \quad (20b)$$

amiből azonnal következik, hogy a csupán koordinátákat tartalmazó *potenciál* fizikai mennyiséghez szintén a vele való szorzást rendeljük:

$$\hat{V}(x) \rightarrow V(x). \quad (20c)$$

Az *energia* fizikai mennyiséghez rendelt operátort ezek után könnyen felírhatjuk:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \hat{V}(x) \quad \rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (20d)$$

és így a fenti operátoregyenlet

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad \rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + V\psi = E\psi$$

valóban a (14) alatti Schrödinger egyenletet adja egydimenziós mozgás esetén.

A fizikai mennyiségeket leíró (reprezentáló) operátorok természetesen nem tetszőleges függvényekre hatnak, hanem – az előző fejezettel összhangban – csak olyan függvényekre, amelyek fizikai állapotot jelenthetnek s így a következő tulajdonságokkal rendelkeznek:

- *egyértékűek*,
- *folytosak*, és
- *normálhatók (korlátosak)*.

Ezen tulajdonságokkal rendelkező függvényeket **reguláris függvényeknek** nevezzük. A reguláris függvények összessége **Hilbert-teret** alkot.

A reguláris függvényekkel végzett számítások során gyakran szerepel két függvény szorzatának integrálja. A jelölések egyszerűsítése érdekében bevezetjük a *skalárszorzat* fogalmát a következő definícióval:

$$\langle f_i | f_k \rangle \equiv \int f_i^* f_k dv,$$

ahol az integrálás a függvényváltozók teljes értelmezési tartományára vonatkozik. Amint látjuk, a skalárszorzat olyan művelet, amely két függvényhez egy (komplex) számot rendel.

A skalárszorzat tulajdonságai a következők:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 + \psi_3 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + \langle \psi_1 | \psi_3 \rangle,$$

$$\langle \psi_1 | 0 \rangle = 0,$$

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^*,$$

$$\langle k \psi_1 | \psi_2 \rangle = k^* \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle,$$

ahol k egy tetszőleges (komplex) számot jelöl. Ezek a műveletek a vektorok skaláris szorzási szabályaira emlékeztetnek, ezért a skalárszorzat két elemét a *bra* ($\langle |$) és *ket* ($| \rangle$) részt célszerű egy absztrakt duális vektortér elemeinek tekinteni. [A bra és ket elnevezést Dirac vezette be az angol *bracket* (zárójel) szó felbontásával.] Így beszélhetünk két függvény *ortogonalitásáról*, amennyiben $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$.

Visszatérve az operátorok sajátérték spektrumához, megjegyezzük, hogy van *folytonos* és *diszkrét* spektrum. Folytonos spektruma van pl. a differenciálás operátornak ($\hat{O} \equiv \frac{d}{dx}$), ui. ennek sajátérték egyenlete a következő:

$$\frac{d}{dx} \psi = k \psi,$$

amelynek megoldása

$$\psi = A e^{kx},$$

amelyből viszont a korlátosság regularitási követelmény miatt $k = \pm i|k|$ következik. A differenciálás operátor sajátértékeit az összes imaginárius szám képezi, sajátfüggvényei pedig $\psi = A e^{\pm i|k|x}$ alakúak.

Diszkrét spektrummal rendelkezik az energiaoperátoron kívül pl. a tükrözés (paritás) operátora, amelynek definíciója a következő: $\hat{P}f(x) = f(-x)$. Sajátérték egyenlete:

$$\hat{P}f(x) = k f(x) = f(-x).$$

Alkalmazzuk $\hat{P}$ -t még egyszer:

$$\hat{P}^2 f(x) = k^2 f(x) = f(x),$$

azaz $k^2 = 1$, amiből viszont $k = \pm 1$ következik. Tehát a paritás operátor sajátértéke a $+1$ vagy -1 lehet. A paritás operátor sajátfüggvényeit az összes páros ill. páratlan függvény képezi.

Bevezetjük az $\hat{O}^+$ *adjungált* operátor fogalmát a következő definícióval:

$$\langle \psi_1 | \hat{O} \psi_2 \rangle = \langle \hat{O}^+ \psi_1 | \psi_2 \rangle,$$

ahol $\psi_2 \in \mathcal{D}_O$, $\psi_1 \in \mathcal{D}_{O^+}$, és általában $\mathcal{D}_O \neq \mathcal{D}_{O^+}$. Az olyan operátort, amelyre

$$\hat{O} = \hat{O}^+ \quad \text{és} \quad \mathcal{D}_O = \mathcal{D}_{O^+},$$

önadjungált operátornak nevezzük.

A fizikában különlegesen fontosak az olyan operátorok, amelyekre

$$\langle \psi_1 | \hat{O} \psi_2 \rangle = \langle \hat{O} \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

érvényes minden ψ_1 és $\psi_2 \in \mathcal{D}_O$ elemre. Ezek a **hermitikus** (v. szimmetrikus, ld. később) operátorok.

Az önadjungált operátorok természetesen hermitikusak is, viszont nem minden hermitikus operátor önadjungált is egyben. Ilyen pl. az impulzus operátor, amely hermitikus, de nem önadjungált a végpontokban eltűnő függvények terén [mivel a p^+ operátor terét választhatjuk bővebbre is (ld. később)].

Tétel: *A hermitikus operátorok alkalmasak fizikai mennyiségek reprezentálására* (leírására, ábrázolására), mivel ezek *valós* sajátértékkel rendelkeznek.

Bizonyítás: Egyrészt

$$\langle \varphi | \hat{O} \varphi \rangle = \langle \varphi | k \varphi \rangle = k \langle \varphi | \varphi \rangle,$$

másrészt

$$\langle \varphi | \hat{O} \varphi \rangle = \langle \hat{O} \varphi | \varphi \rangle = \langle k \varphi | \varphi \rangle = k^* \langle \varphi | \varphi \rangle,$$

amiből $k = k^*$ következik. *Q.E.D.*

Megjegyezzük továbbá, hogy *a szorzat operátor adjungáltja* (a definícióból következően) előállítható a tényező operátorok adjungáltjainak fordított sorrendben történő alkalmazásával:

$$(\hat{O}_1 \hat{O}_2)^+ = \hat{O}_2^+ \hat{O}_1^+.$$

A továbbiakban a fizikai mennyiségeket kizárólag *lineáris hermitikus operátorokkal* fogjuk jelölni, ezért a "kalap" ^ megkülönböztető jelet nem fogjuk alkalmazni.

3.1.1. A HILBERT TÉR.

A $\mathcal{H}$ Hilbert tér olyan ∞ -dimenziós vektortér, amelyben az összes elemnek van véges hossza (normája). A tér elemei az f vektorok, amelyeken alábbi műveletek vannak értelmezve:

i) Skalárral való szorzás.

ha $f \in \mathcal{H}$, és $\lambda \in \mathbb{C}$, akkor $\lambda f \in \mathcal{H}$.

ii) Összeadás.

ha f_1 és $f_2 \in \mathcal{H}$, akkor $f_1 + f_2 \in \mathcal{H}$.

Az i) és ii) tulajdonságból következik, hogy két $\mathcal{H}$ -beli elem lineárkombinációja is $\mathcal{H}$ -beli elem: $f = \sum_i c_i f_i \in \mathcal{H}$.

iii) Értelmezett az elemek közötti "belső szorzat", vagy skalárszorzat:

$$\langle f|g \rangle, \quad \text{ahol } f, g \in \mathcal{H},$$

amely a $\mathcal{H}$ -beli elemeket a $\mathbb{C}$ komplex számok halmazába képezi le. A skalárszorzat a következő tulajdonságokkal rendelkezik:

a) $\langle f|g \rangle = \langle g|f \rangle^*$, ahol $*$ komplex konjugálást jelent;

b) $\langle \lambda_1 f | \lambda_2 g \rangle = \lambda_1^* \lambda_2 \langle f|g \rangle$

c) $\langle f_1 + f_2 | g \rangle = \langle f_1 | g \rangle + \langle f_2 | g \rangle$ és $\langle f | g_1 + g_2 \rangle = \langle f | g_1 \rangle + \langle f | g_2 \rangle$.

d) $|\langle f|g \rangle|^2 \leq \langle f|f \rangle \langle g|g \rangle$, Schwarz egyenlőtlenség.

Az (iii) tulajdonság alapján definiálható egy "hossz" (vagy *norma*): $\|f\|^2 = \langle f|f \rangle$, és az *ortogonalitás*: $f \perp g$, ha $\langle f|g \rangle = 0$. Az $\{f_i\}$ szet *ortonormált*, ha $\langle f_i|f_j \rangle = \delta_{ij}$.

A Hilbert-tér eddigi tulajdonságai hasonlítanak az $\mathcal{E}_n$ véges dimenziós Euklidészi vektortér tulajdonságaihoz. Az eltérés a következő tulajdonságban van:

iv) Egy $\{f_i\}$ vektorsorozat **teljes**, ha bármely $f \in \mathcal{H}$ lineárkombinációként írható fel vele, azaz

$$f = \sum_{i=1}^{\infty} c_i f_i, \quad f_i \in \mathcal{H}, \quad c_i \in \mathbb{C}.$$

A *Riesz-Fischer tétel* az, amely bizonyítja, hogy a fenti összegzés konvergens, azaz a $\mathcal{H}$ -tér teljes. A teljesség megfogalmazásának egy másik módja a következő. Tekintsünk egy vektor sorozatot (Cauchy-sorozat): $f_1, f_2, \dots$. Tegyük fel, hogy minden $\epsilon > 0$ -ra találhatunk egy l -et úgy, hogy bármely véges m -re $\|f_{l+m} - f_l\| < \epsilon$. E sorozat konvergenciáját bizonyítja a Riesz-Fischer tétel, amelyet illetően a matematikai szakirodalomra utalunk (pl. Szőkefalvi-Nagy: Funkcionálanalízis). Népszerűen megfogalmazva: a tétel a végtelen dimenziós Hilbert-tér teljességét bizonyítja, azaz azt, hogy a végtelen dimenziós térben kiválasztható egy végtelen elemből álló sorozat (*bázis*), amely szerint a tér bármely eleme kifejezhető.

Az absztrakt Hilbert-tér egy speciális realizációja (modellje) az $\mathcal{L}_2$ -tér, azaz a *négyzetesen integrálható, komplex értékű függvények tere*, ahol a norma véges:

$$\|f\|^2 = \langle f|f \rangle = \int f^*(x)f(x) dx < \infty.$$

Itt x bárhány változót jelölhet és az integrálás az f függvény teljes értelmezési tartományára kiterjesztendő.

Arról, hogy az $\mathcal{L}_2$ -tér Hilbert tér, úgy győződhetünk meg, hogy belátjuk sorban az i - iv) tulajdonságok érvényességét a négyzetesen integrálható függvények körében is.

3.1.2. OPERÁTOROK.

Definíció: Az operátor leképezési műveletet jelent: egy 'A' operátor a Hilbert-tér bizonyos elemeit Hilbert-térbeli elemekre képezi le. Azon elemek összessége, amelyekre az A operátor, tehát a leképezési művelet, értelmezve van, alkotja az A operátor $\mathcal{D}_A$ *értelmezési tartományát*. Ez általában $\mathcal{H}$ -nak egy résztartománya csupán: $\mathcal{D}_A \subset \mathcal{H}$. Azon elemek összessége, amelyek a leképezés során keletkeznek, alkotja az A operátor $\mathcal{R}_A$ *értékkészletét*. Az operátor értékkészlete is általában csak részhalmaza a teljes Hilbert térnek: $\mathcal{R}_A \subset \mathcal{H}$. Röviden tehát: ha $f \in \mathcal{D}_A \subset \mathcal{H}$, akkor $g = Af \in \mathcal{R}_A \subset \mathcal{H}$.

Lényeges körülmény az, hogy általában $\mathcal{R}_A \neq \mathcal{D}_A$!

Példa. Legyen $A \equiv x^2 \cdot$, és $\mathcal{H} = \mathcal{L}_2$. A négyzetesen integrálható függvények közül kiválasztjuk az $f(x; \mu) = (x^2 + a^2)^{-\mu}$ alakú függvények részhalmazát. Ekkor az A operátor értelmezési tartománya $\mathcal{D}_A = \{f(x; \mu), \mu > 1/4\} \subset \mathcal{H}$. Az A operátor értékkészlete viszont kisebb ennél: $\mathcal{R}_A = \{f(x; \mu), \mu > 9/4\} \subset \mathcal{D}_A$, amint azt integrálással könnyen ellenőrizhetjük.

Csak *lineáris* operátorok érdekelnek bennünket a *szuperpozíció* elvének érvényesülése miatt. Lineáris egy A operátor akkor, ha $f_1, f_2 \in \mathcal{D}_A$ és $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ esetén

$$A(\lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2) = \lambda_1 A f_1 + \lambda_2 A f_2$$

teljesül.

Az operátorokra értelmezve vannak bizonyos műveletek.

1) Számmal való szorzás. Ha A egy $\mathcal{H}$ -n ható operátor $\mathcal{D}_A$ értelmezési tartománnyal, akkor λA is egy $\mathcal{H}$ -n a következőképpen ható operátor $\mathcal{D}_A$ értelmezési tartománnyal:

$$(\lambda A)f = \lambda(Af).$$

2) Operátor összege. Ha A egy operátor $\mathcal{D}_A$ értelmezési tartománnyal, és B egy operátor $\mathcal{D}_B$ értelmezési tartománnyal, akkor $(A + B)$ is egy operátor $\mathcal{D}_A \cap \mathcal{D}_B$ értelmezési tartománnyal, és a következő definícióval:

$$(A + B)f = Af + Bf, \quad f \in \mathcal{D}_{A+B} = \mathcal{D}_A \cap \mathcal{D}_B.$$

3) Egy A operátor $\mathcal{R}_A$ értékkészletét mindazon $\mathcal{H}$ -beli elemek alkotják, amelyeket A -nak $\mathcal{D}_A$ -n való operálásával kapunk. Formálisan:

$$\mathcal{R}_A = A\mathcal{D}_A.$$

4) Operátorok szorzata:

$$(BA)f = B(Af), \quad \text{ha } \mathcal{R}_A \subset \mathcal{D}_B,$$

ui. ekkor $Af \in \mathcal{D}_B$, valamint

$$(AB)f = A(Bf), \quad \text{ha } \mathcal{R}_B \subset \mathcal{D}_A.$$

Így lehet, hogy AB létezik, de BA nem, ill. fordítva.

3.1.3. HERMITICITÁS ÉS ÖNADJUNGÁLTTSÁG.

Legyen A egy $\mathcal{H}$ -n értelmezett operátor és $f \in \mathcal{D}_A$. Tekintsük a $\langle g|Af \rangle$ kifejezést. Ha valamely *fix* $g \in \mathcal{H}$ -ra azt találjuk, hogy

$$\langle g|Af \rangle = \langle h|f \rangle \quad (*)$$

az összes $f \in \mathcal{D}_A$ elemre, akkor definiáljuk az A operátor *adjungált* operátorát, A^+ -t, a következő egyenlettel:

$$h = A^+g, \quad (**)$$

és olyan $\mathcal{D}_{A^+}$ értelmezési tartománnyal, amely mindazon $\{g\}$ elemekből áll, amelyekre $(*)$ és $(**)$ érvényes. Ebben az esetben írhatjuk:

$$\langle g|Af \rangle = \langle A^+g|f \rangle, \quad f \in \mathcal{D}_A, g \in \mathcal{D}_{A^+}.$$

Ahhoz, hogy $h = A^+g$ *egyértelműen* definiált legyen g által, kell, hogy $\mathcal{D}_A$ *sűrű* legyen $\mathcal{H}$ -n belül (a gyakorlatban ez azt jelenti, hogy elég sok elemet tartalmaz). $\mathcal{D}_A$ *sűrű*, ha bármely $g \in \mathcal{H}$ -ra létezik olyan $f \in \mathcal{D}_A$, hogy megadva $\epsilon > 0$ -t, $\|f - g\| < \epsilon$.

Az A operátor **hermitikus**, ha minden $f, g \in \mathcal{D}_A$ -ra

$$\langle g|Af \rangle = \langle Ag|f \rangle \equiv \langle A^+g|f \rangle.$$

Egy operátor *szimmetrikus*, ha hermitikus és értelmezési tartománya sűrű $\mathcal{H}$ -ban.

Szimmetrikus operátorokra $\mathcal{D}_{A^+} \supset \mathcal{D}_A$, mert definíció szerint $\mathcal{D}_{A^+}$ -ba $\mathcal{D}_A$ összes eleme beletartozik, de ennél még több elemet is tartalmazhat.

Amennyiben $\mathcal{D}_{A^+} = \mathcal{D}_A$, és A hermitikus ($A^+ = A$ skalárszorzatban), akkor A **önadjungált** is, nemcsak hermitikus (szimmetrikus).

Példa: az impulzus operátor koordináta reprezentációban,

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}, \quad \mathcal{D}_p = \{f \in L^2(a, b); f(a) = f(b) = 0 \text{ és } f' \text{ korlátos } (a, b) - \text{n.}\}$$

Hermiticitás: legyen $f, g \in \mathcal{D}_p$. Ekkor

$$\langle f|pg \rangle = \int_a^b f^* \frac{\hbar}{i} \frac{dg}{dx} dx = \frac{\hbar}{i} f^* g \Big|_a^b + \int_a^b \left(\frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx} \right)^* g dx = \langle pf|g \rangle.$$

Tehát p hermitikus ($p = p^+$ egy skalárszorzatban), de nem önadjungált, mivel $\mathcal{D}_{p^+} \supset \mathcal{D}_p$.

Válasszuk ugyanis a g elemeket p értelmezési tartományából: $g \in \mathcal{D}_p$, az f elemeket viszont tetszőleges térből, mindössze annyi korlátozással, hogy df/dx véges legyen (a, b) -n és $f(b) = e^{i\Theta} f(a)$, ahol $\Theta = \text{const}$. Ekkor $\langle f|pg \rangle = \langle pf|g \rangle$ ugyancsak fennáll, másrészt az adjungált definícióból $\langle f|pg \rangle \equiv \langle p^+ f|g \rangle$. Tehát $p^+ = p \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$, azonban $\mathcal{D}_{p^+} \supset \mathcal{D}_p$.

Látjuk tehát, hogy ha a $\mathcal{D}_{p^+}$ értelmezési tartományt $\mathcal{D}_{p^+} = \{f \in L^2(a, b), f(b) = e^{i\Theta} f(a) \text{ és } f' \text{ korlátos } (a, b) - n\}$ -nek definiáljuk, akkor p^+ szimmetrikus (hermitikus). Azt mondjuk ilyenkor, hogy p^+ szimmetrikus kiterjesztése p -nek. Viszont p^+ önadjungált is, mert $\mathcal{D}_{p^+} = \mathcal{D}_{p^{++}}$.

Definíció: Egy U operátor akkor és csak akkor **uniter**, ha $\mathcal{D}_U = \mathcal{R}_U = \mathcal{H}$, és

$$\langle Uf|Uf \rangle = \langle f|f \rangle.$$

Ebből következik: $U^+U = 1$ és $UU^+ = 1$.

Cayley-transzformáció: Ha A önadjungált operátor, akkor az

$$U = (A - i1)(A + i1)^{-1}$$

operátor uniter. Fordítottja is igaz: ha U uniter, akkor az

$$A = i(1 - U)^{-1}(1 + U) = i(1 + U)(1 - U)^{-1}$$

operátor önadjungált.

A fent előforduló A^{-1} operátort az A operátor **inverzének** hívjuk: $A^{-1}A = 1$. Az A operátor inverze akkor létezik, ha $Af \neq 0$ (nincs zérus sajátértéke).

3.2. OPERÁTOROKKAL ÉS REGULÁRIS FÜGGVÉNYEKKEL KAPCSOLATOS TÉTELEK

a) KÜLÖNBÖZŐ SAJÁTÉRTÉKHEZ TARTOZÓ SAJÁTFÜGGVÉNYEK ORTOGONÁLISAK EGYMÁSRA

A tételt a Schrödinger egyenlet felhasználásával egyszer már bizonyítottuk, most a fizikailag szóba jöhető operátorok hermitikusságának és linearitásának kihasználásával sokkal hamarabb célhoz érünk.

Bizonyítás: Legyen

$$O\varphi_m = k_m\varphi_m,$$

$$O\varphi_n = k_n\varphi_n,$$

és $k_m \neq k_n \neq 0$. Ezért

$$\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \frac{1}{k_n} \langle \varphi_m | O\varphi_n \rangle = \frac{1}{k_n} \langle O\varphi_m | \varphi_n \rangle = \frac{k_m}{k_n} \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle,$$

amiből következik, hogy

$$\left(1 - \frac{k_m}{k_n}\right) \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = 0,$$

s mivel az első tényező nem zérus, a második kell az legyen, *Q.E.D.*

b) n -SZERES DEGENERÁLTSÁG ESETÉN LÉTEZIK n SZÁMÚ ORTOGONÁLIS SAJÁTFÜGGVÉNY

Bizonyítás: Tegyük fel, hogy f_1 és f_2 ugyanazon k sajátértékhez tartozó két különböző sajátfüggvény, azaz

$$Of_1 = kf_1, \quad Of_2 = kf_2 \quad \text{és} \quad \langle f_1 | f_2 \rangle \neq 0.$$

Alkosson $\varphi_1 \equiv f_1$ és $\varphi_2 \equiv a_1 f_1 + a_2 f_2$ két, egymásra már ortogonális sajátfüggvényt (az eredeti k sajátértékkel természetesen, mivel $O\varphi_1 = k\varphi_1$ és $O\varphi_2 = k\varphi_2$). Az ismeretlen a_1 , a_2 együtthatók egyértelműen meghatározhatók a $\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = 0$ ortogonalitási és a $\langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle = 1$ normáltsági feltételekből, *Q.E.D.*

Kettőnél magasabb degenerációs fok esetén a páronkénti ortogonalitás és a normáltsági feltételek mindig elegendő számú egyenletet szolgáltatnak az ismeretlen lineárkombinációs együtthatók meghatározására.

c) HERMITIKUS OPERÁTOROK SAJÁTFÜGGVÉNYEI TELJES FÜGGVÉNYRENDSZERT ALKOTNAK

E tétel bizonyítását illetően utalunk a matematikai szakirodalomra (Riesz-Fischer tétel), ill. a korábbi analízis tanulmányokra. A tétel alapvető jelentőségű a kvantummechanikában, ui. egy függvényrendszer teljessége azt jelenti, hogy szerinte bármely reguláris függvény sorba fejthető. Azaz egy tetszőleges $\psi(x)$ állapotfüggvényt elő lehet állítani, mint a $\varphi_n(x)$ sajátfüggvények szuperpozíciója:

$$\psi(x) = \sum_n c_n \varphi_n(x), \quad \langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm}.$$

A kifejtési együtthatókat meghatározó

$$c_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x') \psi(x') dx'$$

képletet visszahelyettesítve a kifejtésbe, majd az integrálást és az összegezést felcserélve kapjuk a következő kifejezést

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sum_n \varphi_n(x) \varphi_n^*(x') \right] \psi(x') dx',$$

amelyből leolvasható a teljességet kifejező összefüggés

$$\sum_n \varphi_n(x) \varphi_n^*(x') = \delta(x - x'), \quad (21)$$

ahol $\delta(x)$ a Dirac-féle δ -függvényt jelöli (tulajdonságait ld. később a 4. fejezetben).

A $\psi(x)$ állapot normáltságából a

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_{n,m} c_n^* c_m \langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \sum_r |c_r|^2 = 1 \quad (22)$$

ún. *normáltsági feltétel* következik a kifejtési együtthatókra vonatkozóan.

Folytonos spektrum esetén a fenti egyenletekben összegzés helyett integrálás értendő.

d) Könnyen beláthatjuk még, hogy a normálhatósági regularitási követelmény az energiaoperátor hermitikusságából levezethető:

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{\partial \Psi}{\partial t} \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle H \Psi | \Psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi | H \Psi \rangle = 0,$$

azaz $\langle \Psi | \Psi \rangle = \text{állandó}$.

3.3. A FIZIKAI MÉRÉS ALAPTÖRVÉNYE

Tiszta állapotról beszélünk, ha $\psi = \varphi_n$, azaz ψ éppen az egyik (az n -edik) *sajátállapota* az O operátorhoz tartozó fizikai mennyiségnek. Ha ekkor mérés sorozatot hajtunk végre a mindig ψ állapotban levő rendszeren, akkor biztosak lehetünk benne, hogy a mérések a k_n sajátértéket fogják szolgáltatni. Ilyenkor $c_n \neq 0$ és $c_m = 0$, ($m \neq n$) és $|c_n|^2 = 1$.

Szuperponált állapotról akkor beszélünk, ha nem az előbbi eset valósul meg, azaz ha $\psi = \sum_n c_n \varphi_n$. Ekkor azt mondhatjuk csak, hogy az a φ_n sajátfüggvény van erősebben képviselve a ψ állapotban, amelyikhez tartozó $|c_n|^2$ kifejezés nagyobb. Fel kell tehát tételeznünk (s aztán a tapasztalattal összevetni), hogy a mérés sorozat az ilyen φ_n -hez tartozó k_n sajátértéket nagyobb *valószínűséggel* szolgáltatja eredményül, mint a kisebb $|c_m|^2$ -tel képviselt állapotokhoz tartozó k_m sajátértékeket.

Ezek után a **fizikai mérés alaptörvénye** a következőképpen fogalmazható meg:

annak W valószínűsége, hogy a ψ állapotban lévő rendszeren elvégzett mérés a φ_n sajátfüggvényhez tartozó sajátértéket, k_n -et adja eredményül, éppen

$$W(k_n) = |c_n|^2 = |\langle \varphi_n | \psi \rangle|^2, \quad (23)$$

és a mérés után a rendszer a φ_n sajátállapotban található ($\psi \rightarrow \varphi_n$).

Feltehetjük a kérdést: vajon mennyi a kérdéses mennyiség *középértéke*?

Amennyiben N mérésből N_n -szer mérünk k_n sajátértéket a kezdetben mindig ugyanabban a ψ állapotban levő rendszeren (sokaságon), akkor a középérték definíció szerint:

$$\bar{O} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_n k_n \frac{N_n}{N}.$$

Felhasználva a mérési alaptörvényt, valamint további átalakításokat végezve nyerjük:

$$\begin{aligned} \bar{O} &= \sum_n k_n \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_n}{N} = \sum_n k_n W_n(k_n) = \sum_n k_n |c_n|^2 = \\ &= \sum_{m,n} k_n c_m^* c_n \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \langle \sum_m c_m \varphi_m | O \sum_n c_n \varphi_n \rangle = \langle \psi | O \psi \rangle \equiv \langle O \rangle \end{aligned}$$

Tehát a mérések középértéke megegyezik a fizikai mennyiség sűrűség szerinti átlagértékével, amit *várható érték*nek is nevezünk. (vö. az Ehrenfest tételnél használt jelöléssel.) Ebből is látszik a ψ állapotfüggvény centrális szerepe: az állapotfüggvény ismeretében a mérések várható (átlag)értéke előre meghatározható. A problémát általában az jelenti, hogy valós fizikai rendszer esetén a ψ állapotfüggvény nem ismeretes.

Szemléltető példaként számítsuk ki az L hosszúságú egydimenziós potenciáldobozban levő m tömegű részecske x koordinátájának a középértékét (=várható értékét). Az n -edik gerjesztett állapotban levő részecske állapotfüggvénye az előző fejezetből ismert módon $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_n x$, ahol $k_n = n \frac{\pi}{L}$. A középérték tehát

$$\bar{x} = \langle \psi_n | x | \psi_n \rangle = \frac{2}{L} \int_0^L x \sin^2 \frac{n\pi}{L} x dx = \frac{2}{L} \int_0^L x \frac{1}{2} (1 - \cos 2 \frac{n\pi}{L} x) dx = \frac{2}{L} \cdot \frac{L^2}{4} = \frac{L}{2}$$

Azt nyertük, hogy sok mérés végrehajtása esetén a részecske koordinátájára átlagban $L/2$, azaz a doboz közepének helykoordinátája adódna mérési eredményül.

Számítsuk most ki az impulzus átlagát. Könnyen beláthatjuk, hogy

$$\bar{p}_x = \langle \psi_n | \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} | \psi_n \rangle = 0,$$

azaz az impulzus középértéke zérus. Eredményeink megnyugtatóak; klasszikus fizikai szemléletünk alapján éppen ezen átlagértékekre számíthattunk.

A fizikai mérés alaptörvénye alapján Ehrenfest tétele így is írható:

$$\frac{d\bar{p}_x}{dt} = m \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} = - \frac{\overline{\partial V}}{\partial x} = \overline{F_x} (= \langle F_x \rangle).$$

3.4. HEISENBERG-FÉLE FELCSERÉLÉSI RELÁCIÓK

Mint láttuk, a fizikai mennyiségek lineáris hermitikus operátorokkal reprezentálhatók. Ezen operátorok a fizikai rendszer lehetséges állapotait leíró reguláris függvényeken (a Hilbert tér elemein) hatnak. Két operátor egymás utáni hatása egy függvényre általában különbözik az operátorok fordított sorrendben való alkalmazásának hatásától. Azt mondjuk, hogy az ilyen operátorok nem felcserélhetők: $AB \neq BA$.

Legyen pl. $A = p_x \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ az x -irányú impulzus operátora, míg $B = x \equiv x \cdot$ az x -irányú elmozdulás (koordináta) operátora. Ekkor, mivel

$$\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = \psi + x \frac{\partial \psi}{\partial x},$$

azaz

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}(x\psi) - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \psi,$$

kapjuk a következő összefüggést

$$(p_x x - x p_x)\psi = \frac{\hbar}{i} \psi.$$

Definiáljuk a két operátor felcserélhetőségét mérő *kommutátort*

$$[A, B] \equiv AB - BA.$$

Ha két operátor kommutátora zérus, a két operátor felcserélhető egymással, különben nem.

Fenti eredményünk ψ tetszőleges voltára figyelemmel, kommutátorral is kifejezhető:

$$[p_x, x] = \frac{\hbar}{i}. \quad (24a)$$

Hasonlóképpen

$$[p_y, y] = \frac{\hbar}{i}, \quad (24b)$$

$$[p_z, z] = \frac{\hbar}{i}, \quad (24c)$$

de például

$$[p_x, y] = 0, \quad (24d)$$

és ciklikus felcseréléssel hasonlóan a többi iránypárosításra nézve.

A klasszikus fizikában $[p_x, x] = 0$, azaz a fizikai mennyiségek felcserélhetők egymással. Azt, hogy ez csak közelítő érvénnyel igaz, és bizonyos fizikai mennyiségek (azaz a nekik megfelelő operátorok) nem felcserélhetők egymással, **Heisenberg** ismerte fel elsőként, és ezért a (24a-d) egyenleteket *Heisenberg-féle felcserélési relációknak* hívjuk. A Heisenberg-relációk a természet alapvető törvényei közé tartoznak.

A (24) összefüggés a (14) Schrödinger egyenlettel egyenértékű operátoregyenlet. Ismeretük birtokában, mint fogjuk látni, a fizikai mennyiségek (mérhető) lehetséges értékei meghatározhatók a (nem mérhető) sajátfüggvényekkel együtt.

Tétel: Felcserélhető operátoroknak vannak közös sajátfüggvényei.

Bizonyítás: Legyen φ A -nak nem elfajult sajátfüggvénye: $A\varphi = a\varphi$. Ekkor, mivel $AB = BA$,

$$A(B\varphi) = BA\varphi = Ba\varphi = a(B\varphi),$$

azaz $B\varphi$ sajátfüggvénye A -nak ugyanazzal az a sajátértékkel, ezért $B\varphi$ arányos kell legyen φ -vel: $B\varphi = b\varphi$. Q.E.D.

A tétel fordítottját is bizonyítjuk: Legyen φ közös sajátfüggvénye az A és B operátoroknak, azaz $A\varphi = a\varphi$ és $B\varphi = b\varphi$. Bizonyítjuk, hogy ekkor $[A, B] = 0$ a φ sajátfüggvényre vonatkozóan.

$$AB\varphi = A(b\varphi) = bA\varphi = ba\varphi = B(a\varphi) = BA\varphi$$

Azaz $[A, B] = 0$ (a φ - sajátfüggvényre való alkalmazás szempontjából). Q.E.D.

Tétel: Amennyiben $[F, H] = 0$, azaz egy F fizikai mennyiség operátora felcserélhető az energiaoperátorral, akkor az F mozgásállandó.

Bizonyítás: Tegyük fel, hogy F operátora explicit módon nem függ az időtől: $\partial F / \partial t = 0$. Ekkor az $\bar{F}$ átlagértéke még függhet az időtől a $\Psi(\mathbf{r}, t)$ állapotfüggvényen keresztül. Képezve a középérték idő szerinti deriváltját és kihasználva az állapotegyenletet ($\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} H\Psi$), kapjuk:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{F}}{dt} &= \frac{d}{dt} \langle \Psi | F \Psi \rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} | F \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi | F \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle H\Psi | F \Psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi | F H \Psi \rangle = \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | [H, F] \Psi \rangle. \quad \implies \quad \text{Tehát} \quad \frac{d\bar{F}}{dt} = 0, \quad \text{ha} \quad [H, F] = 0, \quad \text{Q.E.D.} \end{aligned}$$

A

$$\frac{dF}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, F]$$

mennyiséget *kvantummechanikai időderivált*nak nevezzük.

A kvantummechanikai időderivált segítségével gyorsabban levezethetjük Ehrenfest tételét és mélyebb bepillantást nyerhetünk a newtoni mechanika törvényeinek érvényességi körébe.

Legyen $F = x$. Ekkor

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [H, x] = \frac{i}{2\mu\hbar} (p_x^2 x - x p_x^2) \\ &= \frac{i}{2\mu\hbar} (p_x(p_x x - x p_x) + (p_x x - x p_x)p_x) = \frac{1}{\mu} p_x \end{aligned}$$

Legyen $F = p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$. Ekkor

$$\frac{dp_x}{dt} = \frac{i}{\hbar} (H p_x - p_x H) = \frac{i}{\hbar} (V p_x - p_x V) = -\frac{\partial V}{\partial x}.$$

Ennek vége a várható értékét, kapjuk Ehrenfest tételét. Newton törvényei tehát operátor egyenlőség alakjában érvényesek.

3.5. HEISENBERG-FÉLE HATÁROZATLANSÁGI ÖSSZEFÜGGÉSEK

Ha egy mikroszkopikus rendszer ψ állapotfüggvénye az A operátornak (fizikai mennyiségnek) nem sajátfüggvénye, akkor az A által leírt fizikai mennyiség értékére a mérések általában különböző értékeket szolgáltatnak. Minél távolabb vannak ezek az értékek az általuk szolgáltatott átlagértéktől, annál *határozatlanabb* (*elmosódottabb*) ilyenkor a kérdéses fizikai mennyiség értéke, azaz annál nagyobb a mérés *szórása*.

Definiáljuk a **négyzetes közepes eltérést** (szórásnégyzetet):

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle,$$

ahol $\langle A \rangle \equiv \langle \psi | A | \psi \rangle$ az A fizikai mennyiség (= hermitikus operátor) várható (átlag-, közép-) értéke.

Tétel: A négyzetes közepes eltérés sajátállapotban (és csakis ebben) zérus.

Bizonyítás: Kiindulunk a definícióból, majd elvégezzük a négyzetreemelést és a közepelést:

$$(\Delta A)^2 = \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle \psi | (A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2) | \psi \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2.$$

Sajátállapotban ($A\psi = k\psi$) a jobboldal valóban zérust ad $(k \cdot k - k^2) = 0$, egyébként nem.

Bizonyítjuk a következő tételt:

Amennyiben két fizikai mennyiség operátora egymással nem felcserélhető, akkor közepes eltérésük szorzatának legkisebb értéke a két operátor kommutátorából képezett várható érték abszolút értékének a fele, azaz

$$\text{ha } [A, B] = C, \text{ akkor } \Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle C \rangle|. \quad (25a)$$

Bizonyítás: Kiindulunk az analízisből jól ismert

$$\langle f | f \rangle \langle g | g \rangle \geq \langle f | g \rangle \langle g | f \rangle = |\langle f | g \rangle|^2$$

Schwarz-féle egyenlőtlenségből, és definiáljuk az $A' = A - \langle A \rangle$, $B' = B - \langle B \rangle$ hermitikus operátorokat, amelyek kommutátora szintén C : $[A', B'] = C$. Legyen továbbá $f = A'\psi$ és $g = B'\psi$. Ezt a Schwarz egyenlőtlenségbe helyettesítve kapjuk

$$\begin{aligned} (\Delta A \Delta B)^2 &\geq |\langle A' B' \rangle|^2 = \\ &= \left| \left\langle \frac{A' B' + B' A'}{2} \right\rangle + \left\langle \frac{A' B' - B' A'}{2} \right\rangle \right|^2 = \\ &= \left| \left\langle \frac{A' B' + B' A'}{2} \right\rangle \right|^2 + \left| \left\langle \frac{A' B' - B' A'}{2} \right\rangle \right|^2 \\ &\quad + \left\langle \frac{A' B' + B' A'}{2} \right\rangle^* \left\langle \frac{A' B' - B' A'}{2} \right\rangle \\ &\quad + \left\langle \frac{A' B' + B' A'}{2} \right\rangle \left\langle \frac{A' B' - B' A'}{2} \right\rangle^*. \end{aligned}$$

Az utolsó két tag zérust ad, mivel

$$\langle \psi | (A' B' \pm B' A') \psi \rangle^* = \pm \langle \psi | (A' B' \pm B' A') \psi \rangle.$$

Így tehát

$$(\Delta A \Delta B)^2 \geq \left| \left\langle \frac{A' B' + B' A'}{2} \right\rangle \right|^2 + \left| \left\langle \frac{A' B' - B' A'}{2} \right\rangle \right|^2.$$

Az első tagot elhagyva még inkább teljesül az egyenlőtlenség:

$$(\Delta A \Delta B)^2 \geq \left| \left\langle \frac{A' B' - B' A'}{2} \right\rangle \right|^2 = \left| \left\langle \frac{C}{2} \right\rangle \right|^2.$$

Mindkét oldalból gyököt vonva kapjuk a (25a) alatti összefüggést. *Q.E.D.*

Mármint legyen $B = p_x$, $A = x \rightarrow C = -\frac{\hbar}{i}$. Behelyettesítve (25a)-ba, kapjuk a híres *Heisenberg-féle határozatlansági relációkat*

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (25b)$$

továbbá, mivel választhatjuk A -t és B -t az y -, ill. z -irányú elmozdulásnak és impulzusnak is,

$$\Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (25c)$$

$$\Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (25d)$$

A Heisenberg-féle határozatlansági relációnak rendkívül mély fizikai (és filozófiai) tartalma van. Azt mondja ki, hogy a koordináta és az impulzus (vagy két más, egymással nem felcserélhető operátorral reprezentált) fizikai mennyiség mérése egyszerre nem végezhető el egy mindig azonos ψ állapotban levő rendszer-sokaságon. A (25) egyenlőtlenségek pontosan azt jelentik, hogy a mindig azonos ψ állapotban levő rendszerek sokaságán sokszor megmérve az x -értéket, majd sokszor megmérve a p_x értékét, a mérés során adódó Δx és Δp_x hibák (szórások) szorzata még végtelen pontos műszereket használva sem lehet kisebb, mint a (25) által megszabott alsó korlát. Ezt a negatív állítást szokták a klasszikus szemléletünkkel jobban megragadható, egyetlen objektumra vonatkozó kijelentésként megfogalmazni: egy részecske koordinátája és impulzusa (vagy két más, egymással fel nem cserélhető operátorhoz tartozó fizikai mennyiség) egyidejűleg nem vehet fel pontos (határozott) értéket s így nem is mérhető tetszőleges pontossággal egyidejűleg.

A *makrofizikai* mérésekben a tételnek nincs észrevehető folyománya. Legyen ui. egy $m = 5 \times 10^{-3}$ [kg] tömegű golyónk, amelynek helyét $\Delta x = 10^{-6}$ [m] ($=1\mu\text{m}$) pontossággal mérjük meg. Ekkor a golyó sebességének határozatlansága a bizonytalansági relációból következően

$$\Delta v = \frac{\Delta p}{m} \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x} \approx \frac{1 \cdot 10^{-34} \text{ Js}}{2 \cdot 5 \cdot 10^{-3} \cdot 10^{-6} \text{ kg m}} = 10^{-26} \frac{\text{m}}{\text{s}}.$$

Ilyen kis sebességek mérésére, észlelésére a makrofizika nem képes, s így megérthetjük, hogy a (25) egyenleteknek a makrofizikában miért nincs észrevehető jelentőségük.

A *mikrofizikában*, a kis méretek világában viszont igencsak nagy jelentőséggel bírnak a (25) összefüggések. Próbáljuk megmérni az elektron helyét és sebességét egy atomon belül! Az elektron helyének mérési bizonytalansága maximálisan az atom átmérője lehet: $\Delta x = 10^{-10}$ [m]. Az elektron tömege $m = 9 \times 10^{-31}$ [kg], ezért a sebességének mérési bizonytalansága:

$$\Delta v = \frac{\Delta p}{m} \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x} \approx \frac{1 \cdot 10^{-34} \text{ Js}}{1,8 \cdot 10^{-30} \cdot 10^{-10} \text{ kg m}} = 5 \cdot 10^5 \frac{\text{m}}{\text{s}} = 500 \frac{\text{km}}{\text{s}}.$$

Ez azt jelenti, hogy eleve reménytelen vállalkozás egy atomon belüli elektron sebességének és tartózkodási helyének egyidejű mérése.

A Heisenberg-féle határozatlansági reláció egyben azt is jelenti, hogy a mikrofizikában nem érvényes a *pálya* fogalma. Egy részecske pályájáról ui. akkor beszélhetünk, ha a részecskének minden időpillanatban ismerjük a tartózkodási helyét, valamint sebességének nagyságát és irányát. Az atomban ez gyakorlatilag (és elvileg is) kizárt, mert amint láttuk, az elektron helyének egyre pontosabb mérése egyre elmosódottabbá tenné a sebességére vonatkozó mérés értékét és viszont. Nem jelenti ez persze

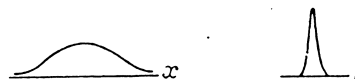
azt, hogy általában az elektronnak, mint mikroszkopikus (tömegű) részecskének, nem beszélhetünk a pályájáról. Katódsugárcsőben, vagy ciklotronban az elektron *pályájának* (vagyis helyének Δx és sebességének Δv) bizonytalansága, elmosódottsága a berendezés méreteihez képest elhanyagolható. Tegyük fel például, hogy a ciklotronban a mágneses tér által 1 [m] sugarú *körpályára* kényszerített elektron helyét (a berendezés tervezhetősége miatt) $\Delta x = 10^{-4}[m]$ pontossággal kell ismernünk (megmérnünk). Ez $\Delta v \approx 5 [\frac{cm}{s}]$ sebességbizonytalanságot jelent, ami viszont a ciklotronbeli tipikusan MeV energiájú elektronsebességekhez viszonyítva elhanyagolható. Tehát ciklotron esetén beszélhetünk az elektron pályájáról.

A Heisenberg-féle határozatlansági összefüggés rávilágít a mikrofizikának a makrovilághoz képesti sokkal gazdagabb mozgásformáira. Tekintsünk pl. egy elektront. A 14/a. ábrán az elektron olyan mozgásállapotban van, hogy helyét jól ismerjük, impulzusa viszont szétkent eloszlást mutat. Az ilyen állapot a makroszkopikus fizikában megismert "tömegpont" fogalomra hasonlít.



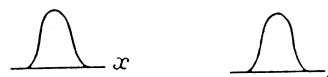
14/a. ábra. A mikrorészecske "tömegpont"-közeli állapotban.

A 14/b. ábrán egy "hullám" mozgásforma ismerhető fel, amelyre az jellemző, hogy az impulzus jól meghatározott, a mozgást végző objektum viszont nem lokalizálódik egy adott helyre.



14/b. ábra. A mikrorészecske "hullám"-közeli állapotban.

A 14/c. ábrán a két előző közti végtelenül sokféle mozgásforma egy lehetséges vátozatát tüntettük fel.



14/c. ábra. A mikrorészecske általános állapotban.

A *zérusponthoz tartozó energiák* létét a Heisenberg-féle határozatlansági relációk segítségével is megérthetjük. Például az egydimenziós

potenciáldoboz esetén a részecske x koordinátájának várható értéke $\langle x \rangle = L/2$ volt. Azaz az x koordináta mérési bizonytalansága is legfeljebb $L/2$ lehet: $\Delta x \leq L/2$. Ebből (25) alapján

$$\Delta v \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x} \geq \frac{\hbar}{mL}$$

következik. Így a lokalizáltság miatti minimális (csupán az elmosódottságból adódó), energiára az

$$E_{\min} = \frac{1}{2}m(\Delta v)^2 \geq \frac{\hbar^2}{2mL^2} = \frac{E_1}{\pi^2},$$

alsó korlátot kaptuk, amely az E_1 zérusponthoz tartozó energia nagyságrendjébe eső érték.

Amint azt a (25a) egyenletből látjuk, a határozatlansági relációk a (24) felcserélési törvények egyenes következményei. Így tehát a (24) felcserélési törvények kapcsán mondottakat érdemes újra megismételni: azok a kvantummechanika legalapvetőbb axiómái. A felcserélési törvényekből levezethető

határozatlansági relációkra pedig úgy tekinthetünk, mint kvantitatív, matematikai formákban kifejezett korlátját annak a szándékunknak, hogy a klasszikus (makroszkópikus) fizikából szerzett absztrakt fogalmainkkal (hely, sebesség, energia, idő, stb.) mikrofizikai (kis mérettartományokban lejátszódó) jelenségeket értelmezzünk, ill. leírjunk.

Röviden érdemes még megjegyezni, hogy a Heisenberg-féle határozatlansági relációk segítségével értelmezhetünk még számos további jelenséget, mint pl. a hidrogénatom (ld. később) alapállapotának szerkezetét (azt tudniillik, hogy miért nem zuhan a magba az elektron), az atomi és magnívók vonalszélességét (és élettartalmuk nagyságrendjét), az impulzusmomentum "furcsaságait" (ld. később), stb. Kiváló magyar nyelvű tárgyalás található a *Marx: Kvantummechanika*, ill. *Nagy Károly: Kvantummechanika* c. tankönyvekben.

Filozófiai tartalom: A Heisenberg-féle határozatlansági összefüggések elvi korlátot állítanak a világ mechanisztikus megismerhetősége elé. Megdőlt a determinisztikus világkép, a Laplace-démon elvileg sem létezhet, mivel nem lehetséges egy adott időpillanatban a világegyetemet alkotó részecskék helyét és sebességét megismerni abszolút pontossággal. A mechanisztikusan determinisztikus világkép helyébe egy sokkal gazdagabb, *lehetőségekkel* teli világszemléletet kaptunk a kvantummechanikától cserébe: a világ nem eleve meghatározott, előre eldöntött valami, amelyben mi emberek (és minden más is) csupán statisztika szerepet játszunk. A fizikai mérés alaptörvényéből (a mérés valószínűségi értelmezéséből), valamint a mechanisztikus determinációt megdőntő Heisenberg-féle határozatlansági relációkból következően a világ minden pillanatban újjászületik, az újjászületés permanens állapotában van.

(Megjegyzendő, hogy noha e világszemlélet gyermekek számára is könnyen felfogható, a köztudatban, de még a műszaki/természettudományos képzettséggel rendelkezők körében sem terjedt el eléggé. Ezért van az, hogy **Teller Ede** minden interjújában, nyilatkozatában, előadásában stb. megragadja az alkalmat arra, hogy egy-két mondatban szót ejtsen ezen új világnézet lényegéről, amely egyben a kvantummechanika legfontosabb tanítása.)

*

Röviden meg kell említenünk az energia és idő fizikai mennyiség, valamint az impulzusmomentum z -komponense és az azimutális szög fizikai mennyiség felcserélési relációjával kapcsolatos problémákat.

Kimutatható az, hogy a nemrelativisztikus kvantummechanikában a tetszetős

$$\text{energiaoperátor : } \hat{E} \rightarrow -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}$$

$$\text{idő : } \hat{t} \rightarrow t$$

hozzárendelés [amelyből formálisan "vezethető" az állapotegyenlet és felírható egy

$$[\hat{E}, \hat{t}] = \frac{\hbar}{i} \quad (\text{hibás})$$

felcserélési reláció], nem létezik a teljes energia korlátossága miatt. Ezen operátorok értelmezési tartományát vizsgálva ugyanis kiderül, hogy az időnek diszkrét spektruma lenne. Bizonyítható azonban, hogy az energiamérés és időtartam mérés szórására mégis fennáll a

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (\text{helyes})$$

Heisenberg féle határozatlansági reláció.

A következő fejezetben fogjuk látni, hogy az impulzusmomentum z komponense az azimutális szög deriváltjával kapcsolatos:

$$L_z \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}.$$

A $[p_x, x] = \hbar/i$ felcserélési reláció analógiájára felírt

$$[L_z, \phi] = \frac{\hbar}{i}$$

reláció szintén problematikus, mert a belőle folyó

$$\Delta L_z \Delta \phi \geq \frac{\hbar}{2} \quad (\text{hibás})$$

határozatlansági összefüggés helytelen. A felcserélési relációból a határozatlansági relációba történő levezetésnél ui. mindig kihasználtuk, hogy az operátorok hermitikusak. Viszont az L_z operátor csak a 2π szerint periódikus függvények terén hermitikus, míg $\phi = \arctan y/x$ nem periódikus. Jackiw és mások megmutatták, hogy periódikus (pl. $\Phi = \sin \phi$) változót használva, csak kis $\Delta \phi$ szórások esetén kapunk a fenti bizonytalansági relációhoz hasonló eredményt.

3.6. AZ AZONOSSÁG ELVE

A mikrovilágban előforduló objektumok (elemi részecskék, elektronok, atomok, atommagok stb.) nagyfokú hasonlóságot mutatnak egymáshoz. A tapasztalat szerint ezen mikrorendszerek nemcsak hasonlóak, hanem minden tekintetben *azonosak* is egymással. Az egyik elektron olyan, mint a másik, ugyanazon tömeggel, töltéssel és más fizikai jellemzőkkel rendelkezik. A Holdról, vagy a meteoritokból származó ásványokat alkotó elemek azonosak a Föld bármely pontján találhatókkal (az elemek rendszerbe foglalhatók).

Makroszkópikus világunkban előforduló fizikai rendszerek közül ilyen nagyfokú hasonlóság leginkább pl. egy hegedű húrjával kapcsolatban figyelhető meg: adott anyagú, hosszúságú, feszességű húr mindig ugyanazon a hangon fog megszólalni, függetlenül attól, hogy hol és mikor készítették. Az azonosság elve élesen ellentmond az atomok bolygómodellként való elképzelésének. Amíg Naprendszerünk számtalan olyan változatban megvalósulhat, amelyek a kezdeti feltételek kismértékű eltéréseiben különböznek csak, addig egy vasatom alapállapotban csak egyféleképpen valósulhat meg. Minden kisebb perturbáció arra nézve, hogy a vasatombeli elektronok mozgását megzavarja, hatástalan addig, amíg a közölt energia éppen nem elegendő a vasatom egyik gerjesztett állapotának létrehozásához.

A mikroobjektumok azonosságát tehát a perturbációkkal szembeni nagyfokú stabilitásával magyarázhatjuk, ami végső soron a fizikai mennyiségek kvantáltságával függ össze. (Ez viszont,

legalábbis ami a zérusponti [alapállapot] energiát illeti, a határozatlansági elvvel kapcsolatos. Az azonosság elve tehát végső soron a (24) csererelációk egyik megnyilvánulási formája. Mindez azonban nagyon áttételesen függ csak össze, ezért leghelyesebb az azonosság elvét egy teljesen független alapelvnek tekinteni.)

Vizsgáljuk most meg, milyen matematikai következménnyel jár az azonosság elve a kvantummechanikában. Mivel az előbbiek szerint a kvantummechanikában határozott pályáról nem beszélhetünk [nem tudjuk nyomon követni (elvileg sem!) az egyes elemi részecskéket], ezért pl. *két* azonos részecskéből álló rendszer $\Psi(1, 2)$ állapotfüggvénye ugyanazt az állapotot kell jelentse, mint $\Psi(2, 1)$. Azaz, minden mérés szempontjából azonosnak kell lenni a két állapotnak, amit a következő két egyenlettel fejezhetünk ki:

$$|\Psi(1, 2)|^2 = |\Psi(2, 1)|^2$$

és

$$|\langle \Phi | \Psi(1, 2) \rangle|^2 = |\langle \Phi | \Psi(2, 1) \rangle|^2.$$

(Az első egyenlet a térbeli megtalálási valószínűségek azonosságát, a második pedig a mérésekkel szembeni azonosságot fejezi ki.)

A fenti egyenletekből az következik, hogy a két hullámfüggvény csak egy egységnyi abszolút értékű konstansban térhet el egymástól:

$$\Psi(1, 2) = k\Psi(2, 1) = k^2\Psi(1, 2).$$

Ebből következik, hogy $k^2 = 1 \rightarrow k = \pm 1$, azaz

$$\Psi(1, 2) = \begin{cases} +\Psi(2, 1) & \text{szimmetrikus, (bozonok)} \\ -\Psi(2, 1) & \text{antiszimmetrikus, (fermionok)} \end{cases}$$

a két részecske felcseréléssel szemben.

Kimondhatjuk tehát az azonosság elvéből fakadó matematikai tételt: *a kvantummechanikában csak olyan reguláris függvények írják le fizikai állapotot, amelyek szimmetrikusak vagy antiszimmetrikusak az azonos részecskék (változóinak) felcserélésével szemben.*

Az azonosság elvéből fakadó további tételek:

Tétel: *Azonos részecskéből álló fizikai rendszer energiaoperátora mindig szimmetrikus: $H(1, 2) = H(2, 1)$.*

Bizonyítás: Tekintsük a

$$H(1, 2)\Psi(1, 2) = i\hbar \frac{\partial \Psi(1, 2)}{\partial t}$$

Schrödinger egyenletet. Cseréljük fel az 1-es részecskét 2-sel. Kapjuk a

$$H(2, 1)\Psi(2, 1) = i\hbar \frac{\partial \Psi(2, 1)}{\partial t}.$$

Schrödinger egyenletet. Használjuk ki az állapotfüggvény azonosság elve következtében meglévő szimmetriáját a $1 \leftrightarrow 2$ koordináta cserével szemben. Kapjuk:

$$\pm H(2, 1)\Psi(1, 2) = \pm i\hbar \frac{\partial \Psi(1, 2)}{\partial t}.$$

Egyszerűsítve a mindkét oldalon előforduló $\pm$ -szal és kivonva a felcserélés előtti Schrödinger egyenletet az iménti Schrödinger egyenletből, kapjuk a szimmetrikusságot jelentő $H(2, 1) = H(1, 2)$ egyenletet Q.E.D.

Tétel: *A (13) állapotegyenletnek mindig létezik szimmetrikus, vagy antiszimmetrikus megoldása.*

Bizonyítás: Legyen $\Omega(1, 2)$ egy megoldás, azaz

$$i\hbar \frac{\partial \Omega(1, 2)}{\partial t} = H(1, 2)\Omega(1, 2).$$

Ekkor viszont $\Omega(2, 1)$ is megoldás, hiszen

$$i\hbar \frac{\partial \Omega(2, 1)}{\partial t} = H(2, 1)\Omega(2, 1) = H(1, 2)\Omega(2, 1),$$

ahol kihasználtuk az előző tételt. Minthogy két megoldás szuperpozíciója is megoldás, a

$$\Psi(1, 2) = \Omega(1, 2) \pm \Omega(2, 1)$$

megoldás már a kívánt szimmetriát fogja mutatni. *Q.E.D.*

Tétel: *Az állapotfüggvény szimmetriája időben állandó.*

Bizonyítás: Az

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_t}{\partial t} = H\Psi_t$$

állapotegyenlet átírható differenciaegyenletté (a $dt \rightarrow 0$ határátmenet elhagyásával):

$$\Psi_{t+dt} - \Psi_t = dt \frac{1}{i\hbar} H\Psi_t,$$

Ebből, átrendezéssel, olyan egyenletet kapunk, amelyben egy későbbi időpillanatbeli állapotfüggvényt egy korábbi időpillanatban érvényes állapotfüggvénnyel fejezünk ki:

$$\Psi_{t+dt}(1, 2) = (1 + dt \frac{1}{i\hbar} H)\Psi_t(1, 2).$$

Mivel a zárójelben álló kifejezés szimmetrikus a két részecske felcserélésével szemben, az állapotfüggvény szimmetriája időben állandó marad. *Q.E.D.*

4. A FIZIKAI MENNYISÉGEKET REPRESENTÁLÓ OPERÁTOROK SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI

Az előző fejezetben láttuk, hogy a fizikai mennyiségek nem a klasszikus fizikában megszokott folytonos, differenciálható függvényekkel reprezentálhatók, hanem lineáris hermitikus operátorokkal. Az O fizikai mennyiség (mérhető) lehetséges értékei a neki megfelelő operátorra vonatkozó $O\varphi_n = k_n\varphi_n$ sajátérték egyenletből határozhatók meg. Itt a k_n sajátértékek jelentik az illető fizikai mennyiség lehetséges értékeit, a φ_n sajátfüggvények pedig a fizikai mennyiség mérésekor játszanak fontos szerepet.

A továbbiakban megismerkedünk néhány fizikai mennyiséget reprezentáló operátorral és megoldjuk sajátérték egyenletüket. Minthogy a legtöbb fizikai mennyiség koordinátából és impulzusból tevődik össze, először ezekkel ismerkedünk meg részletesebben. Ezek után a belőlük leszármaztatható mennyiségek közül az impulzummomentummal, majd az energiával foglalkozunk.

Amint az korábban szerepelt, az x koordináta operátort az x koordinátával való szorzással reprezentáljuk, míg a p_x impulzus operátora az x -szerinti deriválással kapcsolatos:

$$x \rightarrow x \cdot ; \quad p_x \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} .$$

Ezt a reprezentációt *koordináta* (vagy x -) *reprezentáció*nak hívjuk. A koordináta és impulzus operátorának természetesen elképzelhető másféle realizációja is, csak a Heisenberg-féle alapvető

$$[p_x, x] = \frac{\hbar}{i}$$

felcserélési törvénynek kell teljesülnie. Így pl. használatos az ún. *impulzus* (vagy p -) *reprezentáció*, amelyben

$$p_x \rightarrow p_x \cdot ; \quad x \rightarrow -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_x} .$$

A továbbiakban az x -reprezentációban dolgozunk.

4.1. A KOORDINÁTA OPERÁTOR SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI (DISZTRIBÚCIÓK. FOLYTONOS SAJÁTÉRTÉK SPEKTRUM ESETE)

Felírjuk a sajátérték egyenletet:

$$x\varphi_a(x) = a\varphi_a(x).$$

Mivel a részecske az egydimenziós tér (a_1, a_2) részében bárhol előfordulhat, az a sajátérték az $a_1 \leq a \leq a_2$ tartományban tetszőleges értéket vehet fel. A fenti sajátérték egyenlet tehát *folytonos spektrummal* rendelkezik. Ugyanakkor az is kitűnik, hogy a $\varphi_a(x)$ sajátfüggvénynek az $x = a$ hely kivételével zérusnak kell lennie, ugyanis

$$(x - a)\varphi_a(x) = 0.$$

Látjuk ebből, hogy a koordináta operátornak nincs reguláris sajátfüggvénye, mivel φ_a nem folytonos. Ahhoz, hogy a folytonos sajátértékspektrummal rendelkező fizikai mennyiségek sajátfüggvényeit értelmezzük, a függvényfogalom általánosításaként Dirac nyomán bevezetjük a *disztribúciókat* (amelyek magukba foglalják a reguláris függvényeket és ezek konvergens sorozatainak *határértékeit* is). A koordináta operátor sajátfüggvénye disztribúciókkal kapcsolatos.

Egy ilyen disztribúciót Dirac nyomán a következőképpen definiálunk:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\psi(x) dx = \psi(0),$$

ahol $\psi(x)$ egy tetszőleges függvény, az integrációs tartomány véges is lehet, csak az $x = 0$ környékét kell, hogy tartalmazza. Speciálisan $\psi \equiv 1$ -et választva, kapjuk a δ -disztribúció (köznapi nevén: δ -függvény) normalizációs tulajdonságát:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1.$$

$\delta(x)$, jóllehet nem reguláris függvény, előállítható reguláris függvények határértékeként:

$$\delta(x) = \lim_{b \rightarrow 0} \delta_b(x), \quad \text{vagy:} \quad \delta(x) = \lim_{t \rightarrow \infty} \delta_t(x),$$

ahol

$$\delta_b(x) = \frac{1}{2b\sqrt{\pi}} e^{-x^2/4b^2}, \quad \text{vagy:} \quad \delta_t(x) = \frac{\sin^2 xt}{\pi x^2 t}$$

normált reguláris függvények (amelyeknek másféle választása is elképzelhető).

A δ -függvény egy integrális előállítása:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk.$$

A disztribúciók (definícióból következő) további néhány tulajdonsága:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - a)\psi(x) dx = \psi(a),$$

$$\delta(ax) = |a|^{-1} \delta(x), \quad a > 0,$$

$$\delta(-x) = \delta(x),$$

$$\delta(x - a) = \begin{cases} 0, & \text{ha } a \neq x, \\ \infty, & \text{ha } a = x, \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x) \psi(x) dx = -\psi'(0).$$

A koordináta sajátfüggvény ezek után a

$$\varphi_a(x) = \delta(x - a) \quad (26)$$

alakban adható meg. Az, hogy a koordináta sajátállapot maga nem reguláris függvény (azok határértékeként viszont elő állítható), pontosan megfelel annak a ténynek, hogy a természetben nem létezhet abszolút élesen meghatározott koordináta érték (ld. határozatlansági reláció).

Normáltsági összefüggés:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_a^*(x) \varphi_{a'}(x) dx = \delta(a - a'), \quad (27)$$

amely a $\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm}$ ortonormáltsági reláció folytonos spektrum esetre vonatkozó megfelelője.

Teljességi összefüggés:

$$\int_{a_1}^{a_2} \varphi_a(x) \varphi_a^*(x') da = \delta(x - x'), \quad (28a)$$

amelyet (21) folytonos sajátértékspektrum esetére való általánosításaként kaptunk.

(28a)-ból láthatjuk, hogy a folytonos sajátértékspektrumhoz tartozó sajátfüggvények nem normálhatók. Ez nem meglepetés, hiszen már tudjuk róluk, hogy nem tartoznak a reguláris függvények körébe. Ezért a mérési statisztikának a diszkrét spektrum esetére vonatkozó (23) alatti összefüggését is általánosítani kell a következő módon.

A teljesség azt jelenti, hogy egy normált $\psi(x)$ állapotfüggvény kifejezhető a koordináta sajátfüggvények teljes rendszere szerint a következőképpen:

$$\psi(x) = \int_{a_1}^{a_2} c(a) \varphi_a(x) da,$$

ahol a

$$c(a) \equiv \langle \varphi_a | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_a^*(x') \psi(x') dx' \quad [= \psi(a) !]$$

kifejtési együtthatókra fennáll a normáltsági feltételből következő

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \int_{a_1}^{a_2} |c(a)|^2 da \quad (28b)$$

egyenlet, amely (22) folytonos spektrumra való általánosítása. Ez az analógia lehetővé teszi, hogy posztuláljuk: *annak valószínűsége, hogy a ψ állapotban levő rendszeren az x -koordinátára vonatkozó mérési eredmény az (a_1, a_2) sajátérték spektrum $a' \leq a \leq a''$ szakaszába essék:*

$$W(a', a'') = \int_{a'}^{a''} |c(a)|^2 da = \int_{a'}^{a''} |\langle \varphi_a | \psi \rangle|^2 da. \quad (29)$$

Behelyettesítve a koordináta sajátfüggvény kifejezését, kapjuk:

$$W(a', a'') = \int_{a'}^{a''} |\psi(x)|^2 dx,$$

ami az állapotfüggvény jól ismert, térbeli (megtalálási) valószínűségi értelmezésével teljes összhangban van.

Hermiticitás: Elegendő egy dimenzióra bizonyítani ($f, g \in \mathcal{D}_x = \mathcal{L}_2$):

$$\langle f | xg \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx f^* xg = \int_{-\infty}^{\infty} dx (xf)^* g = \langle xf | g \rangle$$

4.2. AZ IMPULZUS OPERÁTOR SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI

Az impulzus (lendület) operátor sajátérték egyenletét részben már tárgyaltuk az előző fejezet 3.1. pontjában. Koordináta reprezentációban a sajátérték egyenlet:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \varphi_{p_x}(x) = p_x \varphi_{p_x}(x)$$

alakú, ahol p_x a keresett sajátérték, $\varphi_{p_x}(x)$ a keresett sajátfüggvény. A megoldás

$$\varphi_{p_x}(x) = A e^{ip_x x / \hbar}$$

alakban írható, a p_x impulzus sajátértékek pedig a $-\infty \leq p_x \leq \infty$ tartományon belül tetszőlegesen (folytonosan) változhatnak. Az A határozatlan normálási állandó az

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{p_x}(x) \varphi_{p_x}^*(x') dp_x = \delta(x - x')$$

teljességi összefüggés megkövetelésével rögzíthető $A = \sqrt{1/\hbar}$ értékre. Az egydimenziós mozgás *impulzus sajátfüggvénye* tehát

$$\varphi_{p_x}(x) = \sqrt{\frac{1}{\hbar}} e^{ip_x x / \hbar}, \quad (30a)$$

sajátértéke pedig p_x , amely folytonosan a $-\infty \leq p_x \leq \infty$ intervallumba eshet.

Az impulzus sajátfüggvényekre (hasonlóan a koordináta sajátfüggvényekhez) a δ -normálás érvényes:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{p_x}^*(x) \varphi_{p'_x}(x) dx = \delta(p_x - p'_x), \quad (30b)$$

azaz az impulzus sajátfüggvény sem tartozik a reguláris függvények körébe (mivel az abszolút pontos impulzus [saját]érték a klasszikus fizikából átvett olyan szemléletes fogalmi absztrakció, amely a természetben a határozatlansági elv miatt nem létezik).

Mérési statisztika: az impulzuseloszlást jellemző

$$c(p_x) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{p_x}^*(x') \psi(x') dx' \equiv \langle \varphi_{p_x} | \psi \rangle$$

spektrális kifejtési együtthatókra fennáll a

$$\int_{-\infty}^{\infty} |c(p_x)|^2 dp_x = 1 = \langle \psi | \psi \rangle$$

normáltsági feltétel.

Annak valószínűsége, hogy a (p_x -impulzusra vonatkozó) mérési eredmény a sajátérték spektrum egy $p' \leq p_x \leq p''$ szakaszába essék:

$$W(p', p'') = \int_{p'}^{p''} |c(p_x)|^2 dp_x. \quad (31)$$

Hermiticitás: Szintén elegendő egy dimenzióra bizonyítani ($f, g \in \mathcal{D}_{p_x} = \mathcal{L}_2$):

$$\begin{aligned}\langle f | p_x g \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx f^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} g = \\ &= \frac{\hbar}{i} \left[f^*(x) g(x) \right]_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f(x) \right)^* g(x) = 0 + \langle p_x f | g \rangle\end{aligned}$$

Megjegyzendő, hogy általában $p_x \neq p_x^+$, mivel $\mathcal{D}_{p_x^+} \supset \mathcal{D}_{p_x}$, amint azt az előző fejezetben részletesen diszkutáltuk. Az impulzus operátora tehát nem önadjungált, viszont hermitikus (az $\mathcal{L}_2$ függvények terén).

4.3. AZ IMPULZUSMOMENTUM OPERÁTOR SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI

Az impulzusmomentum (perdület, impulzusnyomaték) $\mathbf{L}$ operátora kifejezhető a koordináta ($\mathbf{r}$) és az impulzus ($\mathbf{p}$) operátorok vektoriális szorzataként

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{bmatrix} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \begin{bmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{bmatrix}.$$

4.3.1. AZ IMPULZUSMOMENTUM OPERÁTOR KOMPONENSEIRE VONATKOZÓ FELCSERÉLÉSI RELÁCIÓK.

Könnyen belátható a (24)–es felcserélési relációk alkalmazásával, hogy az impulzusmomentum operátor komponensei között a következő felcserélési relációk érvényesek

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \quad (32a)$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x, \quad (32b)$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y. \quad (32c)$$

A határozatlansági összefüggés értelmében ezen felcserélési relációk azt jelentik, hogy az impulzusmomentumnak csak az egyik komponense lehet teljesen meghatározott, míg a másik két komponens határozatlan, elmosódott (szórással rendelkező) értékeket vesz fel mérések esetén. Az elmosódottság mértéke éppen a harmadik komponens nagyságával áll összefüggésben.

A fenti felcserélési relációk vektoriális alakban is összefoglalhatók:

$$\mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\hbar \mathbf{L}. \quad (32d)$$

Az impulzusmomentum *négyzete* viszont mindegyik komponenssel felcserélhető:

$$[\mathbf{L}^2, L_z] = [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_z] = 0, \quad (33)$$

amint az ellenőrizhető egy kis algebrai munkával. Ez utóbbi felcserélési reláció tehát azt jelenti, hogy az impulzusmomentum nagysága és egyik komponense egyidejűleg mérhető (=vehet fel határozott értéket) és közös sajátfüggvény rendszerrel rendelkeznek.

4.3.2. AZ IMPULZUSMOMENTUM z -KOMPONENSÉNEK OPERÁTORA ÉS SAJÁTÉRTÉKEI.

Az impulzusmomentum z -komponensének operátora koordináta reprezentációban az előzőek szerint tehát

$$L_z = xp_y - yp_x = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

Áttérve az (x, y, z) Descartes koordináta rendszerből az (r, ϑ, φ) gömbi polár koordináta rendszerbe

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi,$$

$$y = r \sin \vartheta \sin \varphi,$$

$$z = r \cos \vartheta,$$

és figyelembe véve a következő összefüggést

$$\begin{aligned} \frac{df(\mathbf{r})}{d\varphi} &= \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \varphi} + \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \varphi} \\ &= \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial x} (-y) + \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial y} x + 0 = \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) f, \end{aligned}$$

L_z -re az alábbi egyszerű matematikai alakot nyerjük:

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Az

$$L_z \psi = k \psi$$

sajátérték probléma tehát a $\psi'(\varphi) = \frac{i}{\hbar} k \psi(\varphi)$ differenciálegyenlet megoldását igényli. A megoldás $\psi = A e^{\frac{i}{\hbar} k \varphi}$ alakú, ahol az A integrációs állandót a *normálási* feltételből határozzuk meg:

$$1 = \int_0^{2\pi} |\psi|^2 d\varphi = |A|^2 2\pi \quad \rightarrow \quad |A| = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Az *egyértékűség* regularitási követelményből megszorítást kapunk a k sajátértékekre, ugyanis abból, hogy a φ és $\varphi + 2\pi$ helyen vett megoldás ugyanazt az értéket szolgáltatassa, azaz $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$ legyen, $\frac{k}{\hbar} = m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ következik. Ebből megkaptuk az impulzusmomentum z -komponensének lehetséges (*saját*)értékeit:

$$k_m = \hbar m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (34)$$

ahol a sajátértékeket elláttuk a kvantumszámra vonatkozó indexszel. Azt kaptuk tehát, hogy az impulzusmomentum z -irányú vetülete kvantált, nem vehet fel tetszőlegesen folytonos értékeket, hanem csak $\hbar$, a 2π -vel osztott Planck állandó egész számú többszöröse lehet.

A lehetséges *sajátállapotokat* is az m kvantumszámokkal (az ún. *mágneses, vetület, vagy azimutális* kvantumszámokkal) indexelhetjük:

$$\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (35)$$

Hermiticitás: Könnyen belátható, hogy az $L_z = xp_y - yp_x = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$ operátor a háromdimenziós, négyzetesen integrálható függvények terén hermitikus. Ugyancsak belátható, hogy a 2π szerint periódikus $f(\varphi) = f(\varphi + 2\pi)$ függvények terén is hermitikus az $L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$ operátor. Mindkét esetben ugyanis az ún. "felületi tagok" eltűnnek.

Teljesség:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \psi_m(\varphi) \psi_m^*(\varphi') = \frac{1}{2\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\varphi - \varphi')} = \delta(\varphi - \varphi').$$

4.3.3. AZ IMPULZUSMOMENTUM NÉGYZETÉNEK SAJÁTÉRTÉK PROBLÉMÁJA .

A sajátérték egyenlet a következő

$$\mathbf{L}^2 Y = \Lambda Y$$

Az $\mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ operátort felírhatjuk derékszögű koordináta rendszerben

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 \left[\left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 + \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 + \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \right],$$

vagy polár koordináta rendszerben:

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right).$$

Az impulzusmomentum ez utóbbi reprezentációjában érdemes dolgozni, mivel ez csak két koordináta változót tartalmaz (az r változó kiesett az átalakítás során). A sajátérték egyenlet ezek után

$$-\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) Y(\vartheta, \varphi) = \Lambda Y(\vartheta, \varphi).$$

A reguláris megoldásokat a változóiban szeparált alakban érdemes keresni:

$$Y(\vartheta, \varphi) = F(\vartheta)G(\varphi).$$

Behelyettesítés után és $(-\sin^2 \vartheta / \hbar^2 Y)$ -nal végigszorozva a következő összefüggést kapjuk:

$$\frac{\sin^2 \vartheta}{F} \left(\frac{d^2 F}{d\vartheta^2} + \cot \vartheta \frac{dF}{d\vartheta} \right) + \frac{\Lambda}{\hbar^2} \sin^2 \vartheta = -\frac{1}{G} \frac{d^2 G}{d\varphi^2} = \alpha.$$

Mint hogy a baloldal csak ϑ -tól függ, a középső rész pedig csak φ -tól, az egyenlőség csak úgy állhat fenn, ha mindkét oldal külön-külön állandó. Ezt az állandót jelöltük α -val. A G -re vonatkozó meghatározó egyenlet tehát a következő:

$$\frac{d^2 G}{d\varphi^2} + \alpha G = 0.$$

Ennek megoldása

$$G = Ae^{i\sqrt{\alpha}\varphi}.$$

Az egyértékűség és normálás miatt $\sqrt{\alpha} = m$ =egész és $A = 1/\sqrt{2\pi}$. (G tehát megegyezik L_z sajátfüggvényével.)

F meghatározására ezek után a következő differenciálegyenlet szolgál:

$$\frac{d^2 F}{d\vartheta^2} + \cot \vartheta \frac{dF}{d\vartheta} + \left(\frac{\Lambda}{\hbar^2} - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \right) F = 0.$$

Mivel az egyenletnek a $\sin \vartheta = 0$ helyen szingularitása van, a megoldást a következő alakban keressük:

$$F = \sin^{|m|} \vartheta \cdot P(\cos \vartheta),$$

ahol P egy polinom. Behelyettesítés és $\sin^{|m|} \vartheta$ -val való osztás után, a $\xi = \cos \vartheta$ jelölés bevezetésével kapjuk:

$$(1 - \xi^2) \frac{d^2 P}{d\xi^2} - 2(|m| + 1)\xi \frac{dP}{d\xi} + \left(\frac{\Lambda}{\hbar^2} - |m|(|m| + 1) \right) P = 0.$$

Beírva a polinom $P = \sum_{r=0}^{\infty} c_r \xi^r$ hatványsor alakját, a következő kifejezést nyerjük az ismeretlen kifejtési együtthatókra:

$$\sum_{r=0}^{\infty} \left\{ (r+2)(r+1)c_{r+2} - \left[(r+|m|)(r+|m|+1) - \frac{\Lambda}{\hbar^2} \right] c_r \right\} \xi^r = 0.$$

Ez az egyenlet ξ tetszőleges értékére csak akkor elégül ki, ha a $P(\xi)$ polinom együtthatói között a

$$c_{r+2} = \frac{(r+|m|)(r+|m|+1) - \Lambda/\hbar^2}{(r+1)(r+2)} c_r$$

rekurzós összefüggés fennáll. Mivel $\xi = \pm 1$ ($\vartheta = 0$ vagy π) és $|m| = 0$ esetén a $P(\xi)$ polinom egymást követő tagjainak hányadosa megegyezik a divergens $(1/1 + 1/2 + \dots + 1/r + \dots)$ harmonikus sor megfelelő tagjainak hányadosával ($|m| > 0$ esetén a végtelen sok tagot tartalmazó $P(1)$ sora még divergensebb), a regularitás miatt szükséges az, hogy a P polinom véges fokszámu legyen. Tegyük fel, hogy t az a maximális foksza, ahol P sora megszakad. Ez akkor valósul meg, ha $c_t \neq 0$, de $c_{t+2} = 0$, azaz

$$\Lambda = \hbar^2(t + |m|)(t + |m| + 1).$$

Jelölés: $\ell = t + |m|$. Ezzel az impulzuszmomentum négyzetének *sajátértékeire* a következő összefüggést kapjuk:

$$\Lambda = \hbar^2 \ell(\ell + 1), \quad \ell = 0, 1, 2, \dots \quad (36)$$

A megfelelő *sajátfüggvények*

$$Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) = A \sin^{|m|} \vartheta P_\ell^{|m|}(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (|m| \leq \ell) \quad (37)$$

az ún. gömbfüggvények. A P neve: asszociált Legendre polinom. Ezek a függvények gyakorta használatosak, ezért a legtöbb kézikönyvben megtalálhatók. Itt felírjuk belőlük az első néhányat (ld. a megfelelő 15/a alatti illusztrációkat, ahol az $r(\vartheta) = |Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)|^2 = |F(\vartheta)|^2$ függvényeket ábrázoltuk):

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta, \quad Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi};$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\vartheta - 1), \quad Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\vartheta\cos\vartheta e^{i\varphi}, \quad Y_2^2 = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\vartheta e^{2i\varphi}.$$

Tulajdonságaik közül legfontosabb az *ortonormalitás*:

$$\int_0^\pi \sin\vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_\ell^{m*} Y_{\ell'}^{m'} = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'},$$

a *teljesség*:

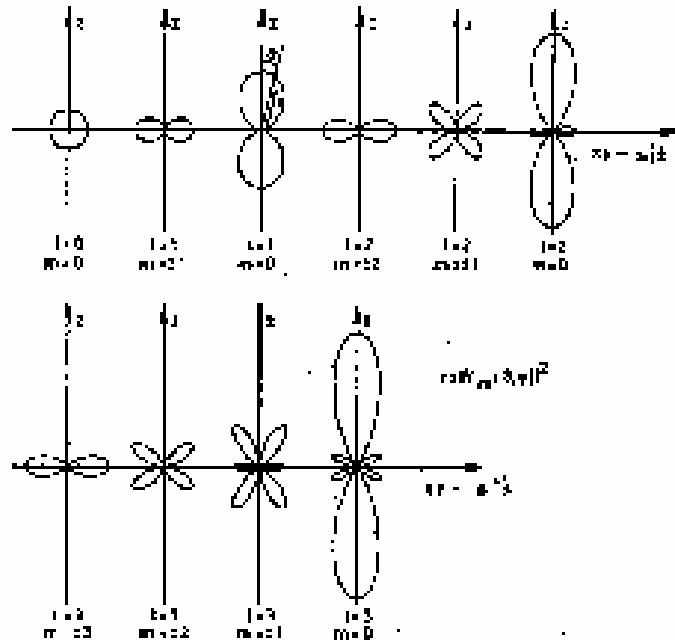
$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) Y_\ell^m(\vartheta', \varphi')^* = (\sin\vartheta)^{-1} \delta(\vartheta - \vartheta') \delta(\varphi - \varphi'),$$

az ún. *addíciós tétel*:

$$\sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) Y_\ell^m(\vartheta', \varphi')^* = \frac{2\ell+1}{4\pi} P_\ell(\cos\Theta),$$

ahol Θ a két $\hat{\mathbf{r}} \equiv (\vartheta, \varphi)$ és $\hat{\mathbf{r}}' \equiv (\vartheta', \varphi')$ irány által bezárt szög, valamint a következő összefüggés:

$$Y_\ell^{-m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)^*.$$



15/a ábra: Az első néhány gömbfüggvény abszolút értékének négyzete: $r(\vartheta) = |Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)|^2$.

15/a ábra: Az első néhány gömbfüggvény abszolút értékének négyzete: $r(\vartheta) = |Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)|^2$.

4.3.4. L_z ÉS L^2 SAJÁTÉRTÉKEI A CSERERELÁCIÓK FELHASZNÁLÁSÁVAL.

Definiáljuk a *nemhermitikus*

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y$$

ún. *léptető operátorokat*.

Könnyen ellenőrizhető tulajdonságaik a következők:

$$(L_{\pm})^+ = L_{\mp}, \quad (a)$$

$$[L_z, L_{\pm}] = \hbar(iL_y \pm L_x) = \pm \hbar L_{\pm}, \quad (b)$$

$$[L_+, L_-] = -2i[L_x, L_y] = 2\hbar L_z, \quad (c)$$

$$[L^2, L_{\pm}] = 0, \quad (d)$$

$$L_+L_- = L_x^2 + L_y^2 - i[L_x, L_y] = L_x^2 + L_y^2 + \hbar L_z, \quad (e)$$

és ezért

$$L^2 = L_+L_- - \hbar L_z + L_z^2 = L_-L_+ + \hbar L_z + L_z^2. \quad (f)$$

Írjuk L_z sajátérték problémáját az

$$L_z\psi_m = m\hbar\psi_m$$

alakba (m -ről még semmit nem tudunk). Ekkor, (b) miatt

$$L_zL_{\pm}\psi_m = L_{\pm}L_z\psi_m \pm \hbar L_{\pm}\psi_m,$$

amiből következik:

$$L_z(L_{\pm}\psi_m) = (m \pm 1)\hbar(L_{\pm}\psi_m),$$

tehát $L_{\pm}$ eggyel felfelé, ill. lefelé lépteti L_z sajátértékeit !

Írjuk fel továbbá L^2 sajátérték problémáját az

$$L^2\mathcal{Y}_{\Lambda}^m = \hbar^2\Lambda\mathcal{Y}_{\Lambda}^m$$

próba alakba. (Λ -ról sem tudunk még semmit, legfeljebb annyit, hogy valós és nemnegatív, $\mathcal{Y}_{\Lambda}^m$ pedig L_z és L^2 közös sajátfüggvénye.)

(d) miatt:

$$L^2(L_{\pm}\mathcal{Y}_{\Lambda}^m) = L_{\pm}L^2\mathcal{Y}_{\Lambda}^m = \hbar^2\Lambda(L_{\pm}\mathcal{Y}_{\Lambda}^m),$$

azaz $L_{\pm}$ az L^2 operátor Λ sajátértékét változtatlanul hagyja.

További felvilágosítással a Λ és m sajátértékekről az $L_{\pm}\mathcal{Y}_{\Lambda}^m$ normája szolgál:

$$\langle L_{\pm}\mathcal{Y}_{\Lambda}^m | L_{\pm}\mathcal{Y}_{\Lambda}^m \rangle = \langle \mathcal{Y}_{\Lambda}^m | L_{\mp}L_{\pm}\mathcal{Y}_{\Lambda}^m \rangle =$$

$$\langle \mathcal{Y}_{\Lambda}^m | (L^2 - L_z^2 \mp \hbar L_z) \mathcal{Y}_{\Lambda}^m \rangle = \hbar^2[\Lambda - m^2 \mp m] = \hbar^2[\Lambda - m(m \pm 1)] = (Q_{\Lambda m}^{\pm})^2 \geq 0,$$

ahol az első egyenlőség (a) miatt, a második (f) miatt igaz. Mármint a norma pozitivitása miatt $m > 0$ esetén

$$\Lambda \geq m(m+1),$$

$m < 0$ esetén pedig

$$\Lambda \geq m(m-1) = (-m)(-m+1),$$

azaz

$$\Lambda \geq |m|(|m|+1),$$

tetszőleges m esetén.

Legyen most $\max m = \ell \geq 0$. Ekkor (f) kihasználásával kapjuk:

$$\hbar^2 \Lambda \mathcal{Y}_\Lambda^\ell = L^2 \mathcal{Y}_\Lambda^\ell = (L_- L_+ + \hbar L_z + L_z^2) \mathcal{Y}_\Lambda^\ell = (0 + \hbar^2 \ell + \hbar^2 \ell^2) \mathcal{Y}_\Lambda^\ell = \hbar^2 \ell(\ell+1) \mathcal{Y}_\Lambda^\ell.$$

Ezért a továbbiakban $\Lambda = \ell(\ell+1)$, ahol $\ell = \max m$ és az egyértelműség miatt indexelhetjük ℓ -el is a közös sajátfüggvényt (és a normát).

Az eddigieket összefoglalva:

$$L_\pm \mathcal{Y}_\ell^m = Q_{\ell m}^\pm \mathcal{Y}_\ell^{m\pm 1}, \quad \text{azaz} \quad \mathcal{Y}_\ell^{m\pm 1} = (Q_{\ell m}^\pm)^{-1} L_\pm \mathcal{Y}_\ell^m,$$

ahol

$$\ell(\ell+1) \geq |m|(|m|+1), \quad \text{azaz} \quad |m| \leq \ell \quad \text{és} \quad Q_{\ell m}^\pm = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm 1)}.$$

Tekintsük most a $\max(m) = \ell$ esetet. Ekkor

$$L_+ \mathcal{Y}_\ell^\ell = 0$$

kell legyen, mert nincs $\mathcal{Y}_\ell^{\ell+1}$ állapot. Hasonlóan, legyen $\min(m) = -\ell$. Ekkor

$$L_- \mathcal{Y}_\ell^{-\ell} = 0$$

kell legyen, mivel nem létezik $\mathcal{Y}_\ell^{-\ell-1}$ állapot. Ezért, kiindulva az $\mathcal{Y}_\ell^\ell$ sajátfüggvényből, az L_- operátor segítségével lépésről lépésre előállíthatjuk az $\mathcal{Y}_\ell^{\ell-1}$, $\mathcal{Y}_\ell^{\ell-2}$, stb. sajátfüggvényeket:

$$L_- \mathcal{Y}_\ell^\ell \sim \mathcal{Y}_\ell^{\ell-1}, \quad (L_-)^2 \mathcal{Y}_\ell^\ell \sim \mathcal{Y}_\ell^{\ell-2}, \dots$$

Mivel $m = \ell, \ell-1, \dots, -\ell$, a léptető operátort valamilyen k egész számszor alkalmazva jutunk el a $-\ell$ legkisebb vetületkvantumszámú állapothoz, azaz

$$\ell - k = -\ell, \quad k = \text{egész}.$$

Ebből következik: $2\ell = k$, azaz $\ell = k/2$. Tehát ℓ csak *egész* (pl. pályaimpulzusmomentum), vagy *félegész* (pl. spin) lehet! Azaz a sajátértékek:

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, \quad \text{vagy} \quad \ell = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$$

és

$$m = \ell, \ell-1, \ell-2, \dots, -\ell+1, -\ell.$$

4.3.5. AZ IMPULZUSMOMENTUM SAJÁTÉRTÉKEINEK ÉRDEKESSÉGEI.

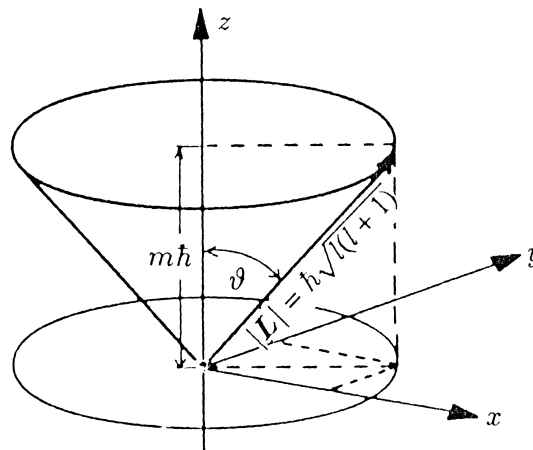
a) Az előző alfejezetben korlátot kaptunk $|m|$ -re, amely az impulzusmomentum z -komponensének sajátértékével, $\hbar m$ -mel kapcsolatos: $|m| \leq \ell$. Másrészt, szintén az előző alfejezetben, az impulzusmomentum nagyságára a $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ értéket kaptuk. Az a különlegesség állt tehát elő, hogy az impulzusmomentum vetületének maximális értéke, $\hbar\ell$, mindig kisebb az impulzusmomentum nagyságának $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ értékénél $\ell \neq 0$ esetén.

Ezt a meglepő eredményt szemléletesen úgy is megfogalmazhatjuk, hogy a koordináta rendszer z -tengelyét nem vehetjük fel az impulzusmomentum vektor irányában, vagyis az impulzusmomentum vektora nem forgatható be egyik tengely irányába sem (ld. 15. ábra).

Magyarázat: a (32a) cserereláció miatt élesen meghatározott L_z állapot (azaz sajátállapot) esetén L_x, L_y csupán elmosódott, hibaszórással rendelkező, nem élesen meghatározott értéket vehet fel, így zérus sem lehet.

b) Az ℓ impulzusmomentummal kapcsolatos kvantumszám zérus értéket is felvehet, míg a bevezetőben tárgyalt Bohr-modellben ($\ell \equiv n - 1$) volt a legkisebb érték az impulzusmomentumra (ld. 1.5. fejezet). [A következő fejezetben fogjuk látni, hogy a H-atom alapállapotában $\ell = 0$, azaz keringésről nem beszélhetünk: az alapállapotú elektron minden keringés nélkül tartózkodik a mag körül; a magba való be nem esését a Heisenberg-féle bizonytalansági reláció segítségével érthetjük meg.]

c) A Bohr elmélet szerint az impulzusmomentum nagysága általánosságban az impulzusmomentum dimenzóval rendelkező $\hbar$ állandó *egész számú* többszöröse lehetett, míg a kvantummechanika alapján az előző fejezetben azt kaptuk, hogy az impulzusmomentum $\hbar$ -nak *nem egész számú* ($\sqrt{2}, \sqrt{6}, \dots$ stb.) többszöröse. Azt, hogy az impulzusmomentum $|\mathbf{L}|$ nagyságára nézve a Bohr-féle $\hbar\ell$ képlet, vagy a kvantummechanika által megadott $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ kifejezés a helyes, a tapasztalat kell eldöntse.



15.Ábra. Az impulzusmomentum precesszálása a z -tengely körül.

4.3.6. A KÉTATOMOS MOLEKULÁK FORGÁSI (ROTÁCIÓS) ENERGIASPEKTRUMA. [Kísérleti bizonyíték az $|\mathbf{L}| = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ képlet helyességére vonatkozóan.]

Kétatomos molekulák (pl. a HCl sósav molekula) színeképét jó közelítéssel a

$$H = H_{törzs} + H_{rot}$$

szerkezetű energiaoperátor határozza meg, ahol $[H_{törzs}, H_{rot}] = 0$. Itt $H_{törzs}$ a molekula elektronjainak $E = E_A, E_B, \dots$ energiaállapotait határozza meg

$$H_{törzs}\psi = E\psi$$

révén, H_{rot} pedig az erre szuperponálódó (lényegesen kisebb) rotációs energiáért felelős. A két atom közös tömegközéppont körül való forgását leíró H_{rot} rotációs energiaoperátort kifejezhetjük a forgás impulzusmomentumával is:

$$H_{rot} = \frac{\mathbf{L}^2}{2\Theta},$$

ahol Θ a molekula tehetetlenségi nyomatékával azonosítható. A molekula forgási energiáját a

$$H_{rot}\psi = \frac{\hbar^2}{2\Theta}\ell(\ell+1)\psi$$

Schrödinger egyenlet, míg a molekula teljes energiáját a

$$H\psi = \left[E + \frac{\hbar^2}{2\Theta}\ell(\ell+1) \right] \psi$$

teljes Schrödinger egyenlet határozza meg. A molekula rotációs spektruma akkor keletkezik, amikor az elektron-szerkezet $E_A \rightarrow E_B$ változásával egyidejűleg a forgási állapotban is egy $\ell' \rightarrow \ell$ kvantumszám változás történik. Az átmenet során kisugárzott fénykvantum energiáját meghatározó összefüggés a következő:

$$h\nu_{AB} = E_A - E_B + \frac{\hbar^2}{2\Theta} [\ell'(\ell'+1) - \ell(\ell+1)].$$

Később (ld. 7. fejezet) megindoklandó okok miatt az $\ell' = \ell \pm 1$ kiválasztási szabály kell érvényesülnön az $\ell' \rightarrow \ell$ rotációs átmenetre. A szögletes zárójelben álló kifejezés ekkor a következő értékeket veheti fel:

$$\text{ha } \ell' > \ell, \quad \text{azaz } \ell' = \ell + 1, \quad [\ell'(\ell'+1) - \ell(\ell+1)] = 2(\ell+1), \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

$$\text{ha } \ell' < \ell, \quad \text{azaz } \ell' = \ell - 1, \quad [\ell'(\ell'+1) - \ell(\ell+1)] = -2(\ell+1), \quad \ell' = 0, 1, 2, \dots$$

A spektrum frekvenciájára tehát a

$$\nu_{AB} = C_{AB} + 2B \times \begin{cases} (\ell+1) & (\ell = 0, 1, 2, \dots) \\ -(\ell'+1) & (\ell' = 0, 1, 2, \dots) \end{cases}$$

képlet a jellemző, ahol $C_{AB} = (E_A - E_B)/h$, $B = h/8\pi^2\Theta$. A színekép ezek szerint egymástól $2B$ távolságra eső vonalakból áll, kivéve a legalacsonyabb (ℓ , vagy ℓ' zérus) rotációs gerjesztéseknek megfelelő részt, amelyre az úgynevezett "nullvonal hiány" a jellemző (ld. 16. ábra).

Tanulságos az iménti levezetést összevetni a Bohr-elmélet által jósolt eredménnyel. A Bohr-elmélet szerint a kisugárzott fény energiája

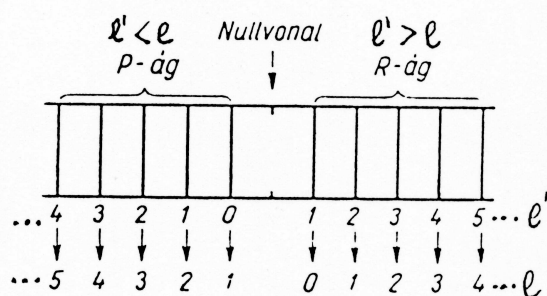
$$h\nu_{AB} = E_A - E_B + \frac{\hbar^2}{2\Theta} [\ell'^2 - \ell^2]$$

lenne, s ez a

$$\nu_{AB} = C_{AB} + 2B \times \begin{cases} (\ell + \frac{1}{2}) & (\ell = 0, 1, 2, \dots) \\ -(\ell' + \frac{1}{2}) & (\ell' = 0, 1, 2, \dots) \end{cases}$$

képletet szolgáltatná a spektrumvonalak szerkezetére, amelyben ezek szerint nem lenne nullvonal hiány, a spektrumvonalak egyöntetűen, egymástól egyforma távolságra helyezkednének el.

A kétatomos molekulák rotációs spektrumában megfigyelt "nullvonal hiány" tehát direkt kísérleti bizonyítékot szolgáltat a kvantummechanika $|\mathbf{L}| = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar$ képletének helyességére a Bohr-elméletből következő $\ell\hbar$ képlettel szemben.



16.Ábra. A kétatomos molekulák rezgési- vagy elektronátmenettel kombinált rotációs szinképe

4.4. AZ ENERGIA OPERÁTORÁNAK SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI.

A kvantummechanikának leggyakoribb alkalmazási területét éppen a kvantummechanikai részecskerendszerek (atomok, molekulák, atommagok, szilárd testek, klaszterek, vegyületek, stb.) lehetséges energiaértékeinek és az ezekhez tartozó hullámfüggvényeknek a meghatározása képezi. Mindez a Schrödinger egyenlet megoldását jelenti, amely csupán a legegyszerűbb valóságos kvantumfizikai rendszerre, az egyetlen elektront Coulomb kölcsönhatással magához láncoló atommag esetére ismert analitikus formában.

A továbbiakban ezen legegyszerűbb kvantummechanikai rendszerek, a hidrogénatom és a hidrogénszerű ionok példáján keresztül mutatjuk be, hogy a kötött állapotban levő fizikai rendszerek energiája *kvantált*, és az (általában végtelen számú) energia sajátértékek a megoldás során fellépő kvantumszámok segítségével egyértelműen klasszifikálhatók.

4.4.1. A HIDROGÉNATOM ÉS A HIDROGÉNSZERŰ IONOK KVANTUMELMÉLETE.

Tekintsünk egy ponthoz rögzített, Z protont tartalmazó atommagot és egyetlen "körülötte keringő" m_e tömegű elektront.

A Bohr-elmélet az ilyen fizikai rendszer energiaértékeire az

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{m_e (kZe^2)^2}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

képletet szolgáltatta, ahol az n kvantumszám, a Bohr-féle kvantumfeltétel révén, az impulzusmomentummal volt kapcsolatos (ld. 1.5. fejezet).

A kvantummechanikában az energiaértékeket a

$$H\psi = E\psi$$

Schrödinger egyenlet megoldása révén kapjuk, ahol az adott fizikai rendszer

$$H = T + V$$

energiaoperátora a T kinetikus energia és V potenciális energia részből tevődik össze. Az

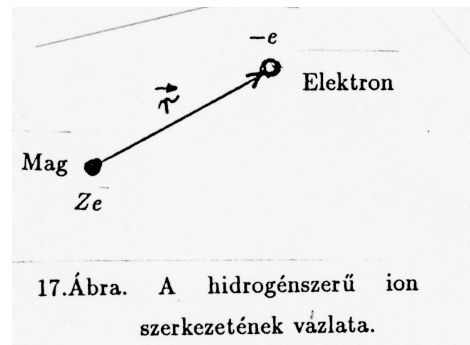
elektron potenciális energiájának operátora a Coulomb kölcsönhatás miatt a következőképpen írható:

$$V = -k \frac{Ze^2}{r}, \quad k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0},$$

ahol ϵ_0 a dielektromos állandó, r az elektron–atommag távolság, e az elemi töltés, Z pedig a rendszám (ld. 17. ábra).

Az elektron kinetikus energiájának operátora

$$T = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m_e} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta$$



felírható gömbi polárkoordinátákban is:

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\mathbf{L}^2(\vartheta, \varphi)}{2m_e r^2},$$

ahol felhasználtuk az előző fejezet eredményét az $\mathbf{L}^2$ impulzusmomentum négyzetének operátor kifejezésére vonatkozóan.

A fenti eredményhez másképpen is eljuthatunk, a $\mathbf{p}^2$ operátor vizsgálatával.

A *klasszikus* mechanika szerint

$$\mathbf{L}^2 = (\mathbf{r} \times \mathbf{p})^2 = r^2 p^2 - (\mathbf{r}, \mathbf{p})^2,$$

amiből

$$\mathbf{p}^2 = p^2 = \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} + p_r^2, \quad \text{ahol} \quad p_r \equiv \left(\mathbf{p}, \frac{\mathbf{r}}{r} \right).$$

A *kvantummechanika* szerint figyelembe kell venni az $\mathbf{r}$ és $\mathbf{p}$ közti felcserélési törvényt, amely miatt egy további, pusztán kvantummechanikai eredetű tag járul a fenti klasszikus összefüggéshez:

$$\mathbf{L}^2 = (\mathbf{r} \times \mathbf{p})^2 = r^2 p^2 - (\mathbf{r}, \mathbf{p})^2 + i\hbar(\mathbf{r}, \mathbf{p}),$$

amiből

$$(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\hbar}{i}(\mathbf{r}, \nabla_{\mathbf{r}}) = \frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r}, \quad \left[\text{mivel} \quad \nabla = \left(\frac{\partial}{\partial r}, \dots, \frac{\partial}{\partial \vartheta}, \dots, \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right]$$

felhasználásával kapjuk:

$$p^2 = \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} - \hbar^2 \frac{1}{r^2} r \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} - \hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \equiv \frac{L^2}{r^2} + \hat{p}_r^2.$$

Centrális tér esetén tehát a kinetikus energia operátorban szereplő p^2 operátornak többféle alakjával találkozhatunk az irodalomban. Álljon itt ezekből néhány emlékeztetőül:

$$p^2 = p_r^2 + \frac{L^2}{r^2},$$

$$p^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{r^2},$$

$$p^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{r^2},$$

$$p^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \right) + \frac{L^2}{r^2},$$

$$p^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 + \frac{L^2}{r^2}.$$

Az utolsó kifejezést az elsővel összehasonlítva megállapíthatjuk, hogy a *radiális impulzus* operátorát a

$$p_r = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)$$

kifejezés definiálja. Az érdekességet itt az $\frac{1}{r}$ -es tag megjelenése jelenti a differenciál operátor mellett, mert naívan általánosítva, a radiális impulzus operátorára csak az első tagot (a nabla operátor radiális komponensét) gondolhatnánk eredményül. Könnyen belátható azonban, hogy p_r csak ezen második tag fellépése esetén hermitikus ($p_r = p_r^\dagger$), valamint ezzel együtt teljesül a következő felcserélési reláció is:

$$[p_r, r] = \frac{\hbar}{i}.$$

A teljes energia operátora (amit általában Hamilton operátornak szoktak nevezni) a H-atom esetében tehát jól elkülönülő radiális és szögfüggő részekből áll, a szögfüggő rész pedig az impulzusmomentum operátor négyzetével kapcsolatos, amelynek problémáját az előző fejezetben megoldottuk. Így, kereshetjük a megoldást a következő szeparált alakban:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{r} R(r) Y_\ell^m(\vartheta, \varphi).$$

A Schrödinger egyenletbe való helyettesítés és az impulzusmomentum négyzetre vonatkozó

$$\mathbf{L}^2 Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)$$

sajátérték egyenletet kihasználása után az ún. *radiális Schrödinger egyenletet* nyerjük az $R(r)$ *radiális hullámfüggvény* meghatározására vonatkozóan:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - kZ \frac{e^2}{r} \right) R(r) = ER(r). \quad (38)$$

4.4.1.a) $E = -|E|$, KÖTÖTT ÁLLAPOT ESETE. DISZKRÉT SPEKTRUM.

A (38) egyenletben szereplő E sajátérték, a teljes energia mindig negatív, $E = -|E|$, amennyiben kötött részecske rendszerről van szó. ($E = 0$ -át éppen az egymástól végtelen távolságra levő és így egymással kölcsönhatásban sem álló, nyugalomban levő részecskékből álló rendszer energiájával definiáljuk; ehhez képest a kölcsönható rendszer energiája kisebb [negatív], mivel energiát kell befektetnünk ahhoz, hogy ezt az idealizált nem-kölcsönható állapotot létrehozzuk. Harmonikus oszcillátor és végtelen mély potenciálvölgy esetén az $E = 0$ pontot természetesen másként kell definiálni.)

A megoldást a már jól ismert Sommerfeld-féle polinom módszerrel fogjuk megkapni (ld. harmonikus oszcillátor, 2.3. pont).

Az

$$r_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{2m_e|E|}}, \quad \varepsilon = k \frac{Zm_e e^2}{\hbar^2} r_0 = Z \frac{r_0}{a_0} = \sqrt{\frac{m_e e^4 Z^2 k^2}{2\hbar^2 |E|}}$$

jelölések bevezetése és a

$$\xi = \frac{2r}{r_0} \quad \left(\rightarrow \quad \frac{1}{r} = \frac{1}{\xi} \frac{2}{r_0}, \quad \frac{d^2}{dr^2} = \frac{4}{r_0^2} \frac{d^2}{d\xi^2} \right)$$

skálatranszformáció elvégzése után a radiális Schrödinger egyenlet a következő egyszerűbb formát ölti:

$$\frac{d^2 R}{d\xi^2} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\varepsilon}{\xi} - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2} \right] R = 0.$$

Ennek aszimptotikus alakja

$$R_a'' = \frac{1}{4} R_a,$$

amelynek megoldása

$$R_a = e^{-\frac{1}{2}\xi}.$$

A teljes megoldást az

$$R = u(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi}$$

alakban keressük, ahol u egy polinom. Szükségünk lesz R első és második deriváltjára:

$$R' = (u' - \frac{1}{2}u)e^{-\frac{1}{2}\xi}, \quad R'' = (u'' - 2 \cdot \frac{1}{2}u' + \frac{1}{4}u)e^{-\frac{1}{2}\xi}.$$

Behelyettesítés után u -ra a következő differenciálegyenletet nyerjük:

$$u'' - u' + \left(\frac{\varepsilon}{\xi} - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2} \right) u = 0.$$

Látjuk, hogy $\xi = 0$ esetén az egyenletnek szingularitása van. Ezen szingularitást kiküszöbölendő, az u polinom nem kezdődhet konstanssal, legkisebb fokszáma ξ^s ($s > 0$) kell legyen. Ezt rögtön kiemelve, az u polinomunk (a szükséges első és második deriváltakkal együtt) a következőképpen írható:

$$\begin{aligned} u &= \xi^s \sum_{i=0}^{\infty} c_i \xi^i = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \xi^{i+s}, \quad s > 0, \\ u' &= \sum_{i=0}^{\infty} c_i (i+s) \xi^{i+s-1}, \quad s > 0, \\ u'' &= \sum_{i=0}^{\infty} c_i (i+s)(i+s-1) \xi^{i+s-2}, \quad s > 0. \end{aligned}$$

Behelyettesítés után az egyenlet a

$$\sum_{i=0}^{\infty} c_i \left[(i+s)(i+s-1) - \ell(\ell+1) \right] \xi^{i+s-2} + \sum_{i=0}^{\infty} c_i \left[\varepsilon - (i+s) \right] \xi^{i+s-1} = 0$$

alakú. Ezt az összefüggést átalakíthatjuk úgy, hogy az első összegzésben szereplő legalacsonyabb fokszámú tagot külön kiírjuk ($i = 0$ esete), a második összegzést pedig az $i \rightarrow i-1$ helyettesítéssel beolvasztjuk az első összegzés maradék részébe:

$$\begin{aligned} &c_0 \left[s(s-1) - \ell(\ell+1) \right] \xi^{s-2} + \\ &\sum_{i=1}^{\infty} \left\{ c_i \left[(i+s)(i+s-1) - \ell(\ell+1) \right] + c_{i-1} \left[\varepsilon - (i-1+s) \right] \right\} \xi^{i+s-2} = 0. \end{aligned}$$

Az egyenlet ξ tetszőleges értékeire csak akkor állhat fenn, ha ξ minden hatványának együtthatója külön-külön zérus. Az első tagból kapjuk:

$$s(s-1) = \ell(\ell+1), \quad \rightarrow \quad s = \ell+1,$$

amely rögzíti az s ún. *indiciális index* értéket. (Megjegyezzük, hogy ennek az indiciális egyenletnek a másik megoldása, $s = -\ell$, az origóban szinguláris, tehát irreguláris hullámfüggvény megoldásra vezetne, amelyet ki kell zárunk a regularitási követelmény miatt. A szóráselméleti részben [ld. 6. fejezet] az irreguláris megoldásnak azonban fontos szerepe lesz.) A második tagból egy *rekurziós* formulát kapunk a polinom együtthatóira nézve:

$$c_i = \frac{i + \ell - \varepsilon}{(i + \ell + 1)(i + \ell) - \ell(\ell + 1)} c_{i-1}, \quad i = 1, 2, \dots$$

Ez a rekurziós kifejezés a polinom magas hatványai esetén a

$$c_i \sim \frac{1}{i} c_{i-1}, \quad i \rightarrow \infty$$

összefüggést szolgáltatja, amelyben az $e^\xi = \sum \xi^i / i!$ sorának rekurziós képletét ismerhetjük fel. Mivel az e^ξ függvény majorálja az $R_a = e^{-\xi/2}$ aszimptotikus megoldást ξ nagy értékeire, szükséges az, hogy az

u polinom véges fokszámú legyen, azaz valahol megszakadjon. Ez úgy lehetséges, ha létezik egy i_{max} legmagasabb összegző index, amelyre $c_{i_{max}-1} \neq 0$, de $c_{i_{max}} = 0$ már. Ez akkor kövekezik be, ha a rekurziós képlet számlálójá ezen legmagasabb fokszám esetére zérussá válik:

$$i_{max} + \ell - \varepsilon = 0, \quad i_{max} = 1, 2, \dots$$

Bevezetve az $n = i_{max} + \ell$ jelölést ($n = 1, 2, \dots$), megállapíthatjuk a fenti levezetésből, hogy ahhoz, hogy a hidrogén atom (és a hidrogénszerű ion) problémájára reguláris megoldást kapjunk, szükséges az, hogy az (energiát is tartalmazó) ε állandó valamelyik zérustól különböző pozitív egész számú n értéket vegye fel:

$$\varepsilon = k \frac{Z m_e e^2}{\hbar^2} r_0 = Z \frac{r_0}{a_0} = \sqrt{\frac{m_e e^4 Z^2 k^2}{2 \hbar^2 |E|}} = n, \quad n = 1, 2, \dots,$$

amelyből az *energiasajátértékekre* az

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{m_e (k Z e^2)^2}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (39)$$

képletet nyerjük. Ez formálisan megegyezik a Bohr-elmélet energiaképletével, viszont tartalmilag különbözik tőle. A levezetés során láttuk ugyanis, hogy az n kvantumszámnak nem direkt, hanem csak áttételes kapcsolata van az impulzusmomentummal. A Bohr elméletben n közvetlenül az impulzusmomentumot számlálta le. A kvantummechanikai levezetés során az impulzusmomentumot az ℓ kvantumszám jellemzi, amely lehet zérus is ($n = 1$ esetén).

[A kvantumszámok egymással való összefüggésére a következő megfontolásból lehet következtetni:

$$n = i_{max} + \ell, \quad i_{max} = 1, 2, \dots \rightarrow n = \ell + 1, \ell + 2, \dots \rightarrow \ell_{max} = n - 1.$$

Ily módon felső korlátot kaptunk az impulzusmomentumra az energiaértékeket meghatározó $n = 1, 2, \dots$ kvantumszám függvényében. Természetesen n az $R(r)$ radiális hullámfüggvény zérushelyeinek számával is kapcsolatos, amit $n - \ell - 1 = i_{max} - 1$ ad meg.]

A tárgyalandó probléma teljes megoldásához hátra van még a hullámfüggvény felírása. Ez a következő alakban áll elő:

$$\psi_{n\ell m}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{r} R_{n\ell}(r) Y_{\ell}^m(\vartheta, \varphi), \quad (40a)$$

ahol a radiális Schrödinger egyenletet kielégítő *radiális* hullámfüggvény

$$R_{n\ell}(r) = L_{n\ell}\left(\frac{2r}{r_0}\right) e^{-r/r_0}, \quad r_0 = a_0 n / Z, \quad (40b)$$

$a_0 = \hbar^2 / m_e k e^2 \sim 0,53 \times 10^{-10} m$ a Bohr sugár, $L_{n\ell}$ pedig (a korábban u -val jelölt) az $(\ell + 1)$ hatvánnyal kezdődő $(n + 1)$ -ed fokú ún. Laguerre-polinom. (Ne tévesszük össze az itteni r_0 állandót a Bohr elmélet tárgyalásánál használt $r_n = \frac{a_0}{Z} n^2 = n r_0$ -al!) A radiális hullámfüggvények ortonormáltak:

$$\int_0^\infty dr R_{n\ell}^* R_{n'\ell} = \delta_{nn'}.$$

Az alábbiakban megadunk néhányat közülük:

$$R_{10}(r) = 2r \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0},$$

$$R_{20}(r) = 2r \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{Zr}{2a_0} \right) e^{-Zr/2a_0},$$

$$R_{21}(r) = \frac{2r}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} \frac{Zr}{2a_0} e^{-Zr/2a_0},$$

$$R_{30}(r) = 2r \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \left[1 - \frac{2Zr}{3a_0} + \frac{2(Zr)^2}{27a_0^2} \right] e^{-Zr/3a_0}.$$

A radiális hullámfüggvények $R_{nl} \rightarrow r^{\ell+1}$ -ként tartanak az origóban ($r \rightarrow 0$) a nullához. A teljes hullámfüggvény viszont $\psi_{nlm} \rightarrow r^\ell$ -ként, miközben $r \rightarrow 0$. Ezért véges valószínűsűrsűrűsége van annak, hogy az elektron a mag helyén tartózkodik alapállapot esetén. Sőt, $\psi_{100}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \exp(-Zr/a_0)$ miatt az elektronnak éppen a magban való tartózkodási valószínűsűrsűrűsége a legnagyobb. Ugyanis, az elektron tartózkodási valószínűsűrsűrűségét az (r, ϑ, φ) pontban éppen $|\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi)|^2$ adja meg. Ha viszont az iránt érdeklődünk, hogy milyen *valószínűséggel* találjuk meg az elektront egy $\mathbf{r} = (r, \vartheta, \varphi)$ körüli d^3r térfogatelemben, akkor ennek meghatározására a

$$|\psi|^2 d^3r = \frac{1}{r^2} R_{nl}^2(r) |Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)|^2 r^2 dr d(\cos \vartheta) d\varphi \equiv W_{nl}(r) dr |Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)|^2 d(\cos \vartheta) d\varphi$$

képlet szolgál, amelyben a $W_{nl}(r) = R_{nl}^2$ mennyiséget *radiális valószínűségnek* nevezzük. A radiális valószínűség tehát azt fejezi ki, hogy milyen valószínűséggel tartózkodik az elektron egy $r, r + dr$ gömbhéjban. A W_{nl} valószínűség már azt a fizikai képet adja az atombeli elektron elhelyezkedéséről, amit klasszikus szemléletünk alapján várunk: az origó körül zérus valószínűséggel található az elektron ($W_{nl}(0) = 0$), a

$$0 = \frac{dW_{nl}}{dr} \Big|_{r_{nl}}$$

egyenlettel definiált r_{nl} sugarú gömbhéjban viszont maximális valószínűséggel található meg az elektron. Konkrét számolással néhány r_{nl} mennyiségre a következő érték adódik:

$$r_{10} = \frac{a_0}{Z}, \quad r_{21} = 4 \frac{a_0}{Z}, \quad \dots, \quad r_{n,n-1} = n^2 \frac{a_0}{Z}.$$

Ezek tehát a Bohr elmélet szolgáltatta pályasugarak. A 18/a ábrán bemutatott néhány $W_{nl}(r)$ valószínűség függvény a főhéjak térbeli elhelyezkedését szemlélteti.

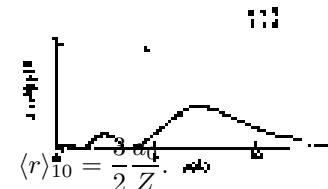
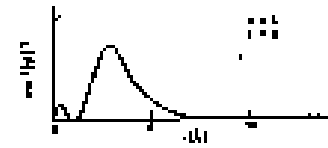
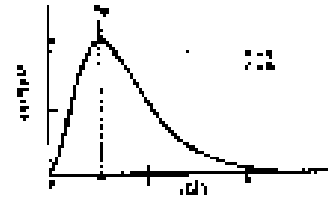
Feltehetjük azt a kérdést is, hogy mi az *átlagértéke* a radiális koordinátára vonatkozó mérésnek? A választ az $\langle r \rangle$ kifejezés adja meg:

$$\langle r \rangle_{nl} = \int_0^\infty dr r R_{nl}^2(r) = \int dr r W_{nl}(r) = \frac{1}{2} \frac{a_0}{Z} (3n^2 - \ell(\ell+1)). \quad \text{Pl. } \langle r \rangle_{10} = \frac{3}{2} \frac{a_0}{Z}.$$

Hermiticitás: Könnyen belátható, hogy a H-atom energiaoperátora hermitikus a reguláris függvények terén.

Ortonormáltság: A H-atom kötött állapoti energiasajátfüggvényei ortonormált függvényrendszert alkotnak. Figyelemmel a radiális hullámfüggvények, és a gömbfüggvények ortogonalitására,

$$\langle \psi_{nlm} | \psi_{n'\ell'm'} \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}.$$



18/a. ábra. A hidrogénatombeli elektron radiális eloszlási valószínűsége néhány (nl) állapotban.

4.4.1.b) $E \geq 0$, SZÓRÁSI ÁLLAPOT ESETE. FOLYTONOS SPEKTRUM.

Ahhoz, hogy a H-atom sajátfüggvények teljes rendszert képezzenek, szükség van a pozitív energiájú állapotokhoz tartozó megoldások figyelembevételére is, mert a kötött állapoti sajátfüggvények önmagukban *nem* alkotnak teljes rendszert.

A folytonos spektrumhoz tartozó energiasajátfüggvényeket $\psi_E(\mathbf{r})$ -vel jelölve, bizonyítható a *teljességi összefüggés*:

$$\sum_{nlm} \psi_{nlm}(\mathbf{r}) \psi_{nlm}^*(\mathbf{r}') + \int_0^\infty dE \psi_E(\mathbf{r}) \psi_E^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

A ψ_E folytonos spektrumhoz tartozó ún. Coulomb-hullámfüggvényekkel később, a 6-ik fejezetben ismerkedünk meg.

4.4.2 A HIDROGÉNATOM VONALAS SZÍNKÉPE.

A hidrogénatom vonalas színeképének (ld. 18. ábra) megértését a kvantummechanika tette lehetővé. Az előforduló kvantumszámok és elnevezéseik a következők:

főkvantumszám: $n = 1, 2, 3, \dots$

mellékkvantumszám: $\ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1$

mágneses kvantumszám: $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, 0, \dots, \ell - 1, \ell$

Mint hogy a (39)-es energiasajátérték csak a főkvantumszámtól függ, az egyes energiaszintek elfajultak. A degeneráció foka: $\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2$. Az n -nel jellemzett szinteket *főhéj*-nak nevezzük. Adott n esetén a hozzátartozó különböző ℓ -ű állapotok *alhéj*-at alkotnak; *jelük:* $(n\ell)^x$, ahol x jelenti az alhéjba tartozó elektronok számát. Az ℓ mellékkvantumszámoknak az abc különböző betűit feleltetjük meg: az $\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots$ stb. kvantumszámokat rendre az $s, p, d, f, g, h, i, \dots$ stb. betűkkel jelöljük. Így pl. beszélünk $(1s), (2p)^3, (3d)^2, \dots$ stb. alhéjakról.

Az alapállapoti szintet $n = 1$ jellemzi:

$$E_1 = -13,6 \text{ eV}, \quad \ell = 0.$$

Az első gerjesztett állapotot $n = 2$ esetén kapjuk:

$$E_2 = E_1/4, \quad \ell = 0, 1.$$

A harmadik ($n = 3$) szinthez tartozó energia és mellékkvantumszámok értékei:

$$E_3 = E_1/9, \quad \ell = 0, 1, 2.$$

A hidrogénatom gerjesztett állapotainak száma végtelen.

A hidrogénatom színeképe egymástól elkülönülő részekből áll.

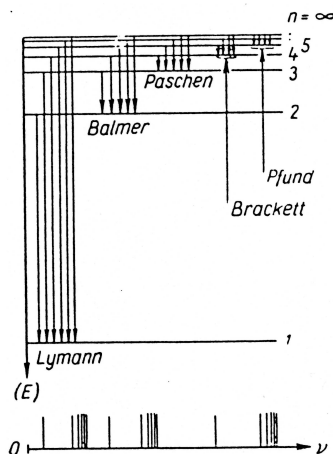
Az ultraibolya frekvenciatartományba eső ún. *Lyman*-sorozat akkor keletkezik, amikor a gerjesztett "pályákról" az alapállapotba ($n = 1$) történik a legerjesztődés.

Balmer-sorozatnak hívjuk a színekép (látható tartományba eső) azon részét, amely az $n = 2$ szintre való legerjesztődés révén keletkezik.

Infravörös tartományba eső kis energiák tartoznak azon kisugárzásokhoz, amelyekben az $n = 3$ -as szint a legerjesztődés első állomása; ez a Paschen-sorozat.

4.5. A SPIN OPERÁTORÁNAK SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI.

4.5.1. KÍSÉRLETI BIZONYÍTÉKOK AZ ELEKTRONSPIN LÉTÉRE.



18.Ábra. A hidrogénatom színeképének keletkezése.

A XX. század 20-as éveiben egyre inkább uralkodóvá vált az a felfogás, hogy az elektronnak saját impulzusmomentummal, *spinnel* kell rendelkeznie. Ezt az álláspontot sokféle kísérleti evidencia támasztotta alá.

a) A közönséges Zeeman-effektus: A XIX. század végén Zeeman holland fizikus a hidrogénszínekép tanulmányozása közben észrevette, hogy homogén mágneses tér hatására a színeképvonalak kiszélesednek és felhasadnak.

A jelenség az atomi energianívók felhasadásával magyarázható. A klasszikus elektrodinamikából ismeretes, hogy a köráram mágneses teret kelt. Az atomban az $\mathbf{L}$ impulzusmomentummal rendelkező elektron elemi köráramot képvisel, amelynek mágneses tere a kör felületére merőleges irányban

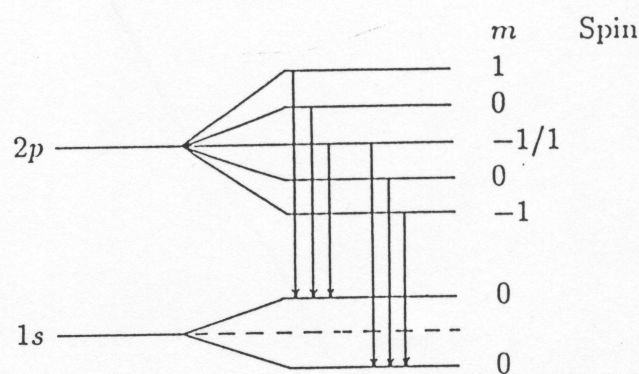
$$B = If = \left(\frac{-ev}{2\pi r} \right) r^2 \pi = -\frac{e}{2m_e} r m_e v.$$

Ennek alapján az $\mathbf{L}$ impulzusmomentumhoz tartozó elemi mágneses momentum

$$\mathbf{M}^L = -\frac{e\hbar}{2m_e} \frac{1}{\hbar} \mathbf{L} \equiv -\mu_B \frac{1}{\hbar} \mathbf{L}, \quad (41a)$$

$$M_z^L = -\frac{e\hbar}{2m_e} \frac{1}{\hbar} L_z \equiv -\mu_B \frac{1}{\hbar} L_z, \quad (41b)$$

ahol a $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ arányossági tényező neve: Bohr magneton. Értéke: SI-ben 9.27×10^{-24} J/T, cgs-ben 9.27×10^{-21} erg/G.

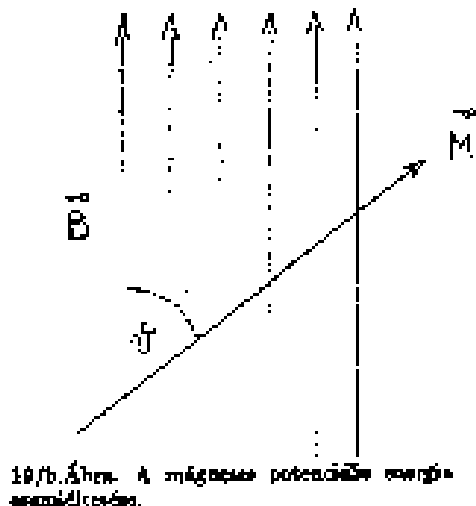


19.Ábra. A Zeeman-effektus értelmezése.

A $\mathbf{B} = (0, 0, \mathcal{B})$ homogén mágneses tér erőhatást gyakorol a mágneses dipólusra. Az ennek megfelelő potenciális energia a

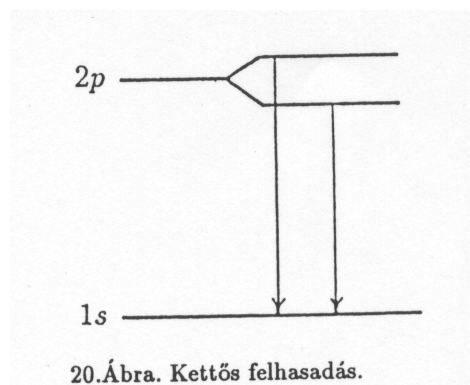
$$V_{mágn}^L = -(\mathbf{M}^L, \mathbf{B}) = \mu_B \frac{1}{\hbar} L_z \mathcal{B} = \mu_B m_\ell \mathcal{B}$$

alakba írható, amely – a teljes Hamilton operátort módosítva – az atomi elektronnívók $[(2\ell + 1)\text{-szeres}]$ felhasadásához vezet. Tehát pl. a p - nívó felhasadása háromszoros. Ezzel szemben a színeképek tanulmányozása arra a következtetésre vezetett, hogy a p - nívó felhasadása *öttszörös* (ld. 19. ábra).



b) *Anomális Zeeman-effektus*: Bizonyos esetekben (pl. páratlan rendszámú atomok esetén) külső mágneses tér hiányában is észleltek nívófelhasadást a színeképek gondos tanulmányozása révén.

Úgy tűnt tehát, hogy az elektron egy további szabadsági fokkal rendelkezik, és ez saját impulzusmomentumban (*spin*ben) nyilvánul meg, amelyhez (töltött részecskéről lévén szó) saját mágneses momentum társul. Ez utóbbinak az atom belső mágneses terével való kölcsönhatása eredményezi aztán a megfigyelt dublett szerkezeteket (20. ábra). A dublett szerkezet egyúttal azt is sugallta, hogy ezen új szabadsági fokhoz feles kvantumszám társul.



c) *Stern-Gerlach kísérlet (1922)*: Stern és Gerlach keskeny, ezüst atomokból álló nyalábot bocsátott át inhomogén mágneses téren. A tér az Ag-atom nyalábot *két részre* osztotta (21. ábra).

Mivel az Ag-atom zárt héjjal s azon kívül levő egyetlen elektronnal rendelkezik, amely az $n = 5$ és $\ell = 0$ kvantumszámmal jellemzett állapotban van, az ezüst atom teljes pálya impulzusmomentuma ($\mathbf{L}$) zérus, az ebből eredő mágneses nyomaték ($\mathbf{M}^L$) tehát zérus. Ha létezik spin (saját impulzusmomentum), egyedül ez hordozhat mágneses nyomatékot ($\mathbf{M}^S$), amit meg lehet mérni *inhomogén* mágneses tér alkalmazásával. A mágneses kölcsönhatás potenciális energiája ugyanis

$$V_{mágn}^S = -(\mathbf{M}^S, \mathbf{B}),$$

és a nyalábra (az Ag-atomokra) ható erő

$$-\nabla V_{m\acute{a}gn}^S = \nabla M_z^S \mathcal{B}(z) = (0, 0, F_z)$$

$$F_z = M_z^S \frac{d\mathcal{B}(z)}{dz}$$

F_z az eltérülés mértékéből meghatározható, $d\mathcal{B}(z)/dz$ kísérleti adat, így M_z^S mérhető. A mérések $M_z^S = \mp \mu_B$ értéket szolgáltatottak az ezüst atom külső elektronjának mágneses momentumára. Ez az eredmény az elektron saját impulzusmomentumának z -komponenséhez felelő kvantumszámot rendel, ugyanis

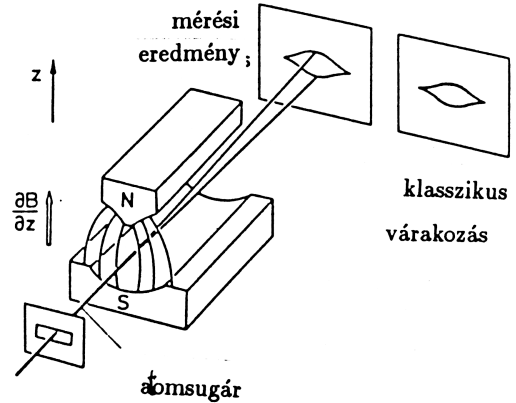
$$M_z^S = \mp \mu_B = -(2\mu_B)m_s \rightarrow m_s = \pm \frac{1}{2}$$

($m_s = egész$ a nyaláb legalább három részre való szakadását jelentené). Egyúttal kifejezi azt az érdekes körülményt is, hogy az elektron saját impulzusmomentumához *kétszer annyi* ($2\mu_B$) mágneses momentum tartozik, mint a pályamozgáshoz. Az elektron saját impulzusmomentumát $\mathbf{S}$ -sel jelölve, a spinből eredő mágneses momentum tehát a következőképpen írható:

$$\mathbf{M}^S = -2\mu_B \frac{1}{\hbar} \mathbf{S} \quad (41c)$$

Ezt az eredményt erősíti meg a következő kísérlet is.

d) *Einstein-de Haas kísérlet (1915)*: Einstein és de Haas eredetileg azt vizsgálta, vajon igaz-e az a feltetelezés, hogy az anyagok mágnesezhetőségéért (a ferromágnességért) az $\ell \neq 0$ impulzusmomentummal jellemezhető és ezért elemi köráramot képviselő (s így mágneses momentumot hordozó) elektronok pályaimpulzusmomentumának egyirányú beállása a felelős.



21.Ábra.A Stern-Gerlach kísérlet szemléltetése.

A 22. ábrán látható elrendezésben vékony szálon függő vashengert árammal átfolyt tekercsbe helyeztek. A tekercsben kialakuló mágneses tér egyirányba állítja be az (i -vel jelölt) elemi köráramok mágneses momentumát, amelynek eredője egyenesen arányos az elemi impulzusnyomatékok eredőjével:

$$\frac{\sum_i |\mathbf{M}_i|}{\sum_i |\mathbf{L}_i|} = \frac{M}{L} = \mu_B/\hbar,$$

az arányossági tényező $1\mu_B$ Bohr-magneton (per $\hbar$).

A tekercsen átfolyó áram irányának megváltoztatása az elemi köráramoknak megfelelő parányi "iránytűk" (mágneses momentumok) átfordulását eredményezi, amely az elemi impulzusmomentumok ellentettre változásával jár együtt. Az impulzusmomentum megmaradásának törvénye szerint ezt az impulzusmomentum változást a henger mérhető elfordulása kompenzálja, amit a torziós szálra erősített tükör segítségével meg lehet figyelni és mérni ($\Delta L_{mért}$). Ugyancsak mérni lehet a vashenger mágnesezettségét és az átmágnesezésből eredő mágneses tér változást ($\Delta M_{mért}$). A két mérhető mennyiség arányára Einstein és de Haas a

$$\frac{\Delta M_{mért}}{\Delta L_{mért}} = 2\mu_B/\hbar$$

értéket kapták, amely a 2-es faktor megjelenése miatt csak úgy értelmezhető, hogy a ferromágnesség *nem* az elektronok pályaimpulzusmomentumával kapcsolatos, hanem az elektronok saját impulzusmomentumával, azaz spinjével. (Ezt az értelmezést csak később, Compton, Uhlenbeck, Goudschmidt, Pauli és Heisenberg munkássága révén sikerült megadni.)

4.5.2. A SPINOPERÁTOR SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI.

A fenti eredmények alapján megérthetjük a 19. ábrán bemutatott nívóséma multiplicitását. A $\mathbf{B} = (0, 0, \mathcal{B})$ z -irányú homogén mágneses térrel való kölcsönhatás révén keletkező

$$V_{magn} = -(\mathbf{M}^L + \mathbf{M}^S, \mathbf{B}) = \mu_B \mathcal{B} \frac{1}{\hbar} (L_z + 2S_z) = \mu_B \mathcal{B} (m_\ell + 2m_s)$$

potenciális energiaoperátor $2(2\ell + 1)$ -szeres nívófelhasadást eredményez, amelyből $\ell = 1$ esetén az egyik nívó kétszeresen degenerált ($m_s = \pm 1/2$ és $m_\ell = \mp 1$).

A fenti eredmény implicite tartalmazza a spin z -komponensének sajátérték egyenletét:

$$S_z \chi_s^{m_s} = \hbar m_s \chi_s^{m_s}, \quad m_s = \pm \frac{1}{2}, \quad (42a)$$

ahol $\chi_s^{m_s}$ a spinoperátor négyzetének is sajátfüggvénye:

$$\mathbf{S}^2 \chi_s^{m_s} = \hbar^2 s(s+1) \chi_s^{m_s}, \quad s = \frac{1}{2}. \quad (42b)$$

A spinoperátor a pályaimpulzusmomentummal rokon felcserélési szabályoknak tesz eleget:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, \quad [S_z, S^2] = 0, \quad \text{stb.}, \quad \text{illetve} \quad [\mathbf{S}, \mathbf{r}] = 0, \quad [\mathbf{S}, \mathbf{p}] = 0, \quad [\mathbf{S}, \mathbf{L}] = 0.$$

Ez elegendő a spinoperátor és spinsajátfüggvény megalkotásához, amelyeknek a leginkább használatos reprezentációban felírt alakját levezetés nélkül közöljük ($\mathbf{S} = \hbar \vec{\sigma}/2$, $\vec{\sigma}$ komponensei az ún. *Pauli-matrixok*):

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (43a)$$

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, \quad [\sigma_z, \sigma^2] = 0, \quad \text{stb.}$$

$$\alpha \equiv \chi_{1/2}^{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \beta \equiv \chi_{1/2}^{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (43b)$$

Ortonormalitás:

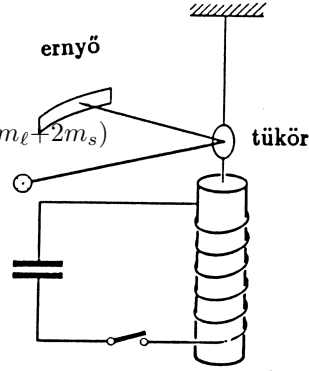
$$\chi_s^{m_s*} \chi_{s'}^{m'_s} = \delta_{ss'} \delta_{m_s m'_s} \quad s = \frac{1}{2}, \quad m_s = \pm \frac{1}{2}.$$

[A spin konzisztens bevezetése a 8. fejezetben történik meg, ahol a Dirac egyenlet adja meg a relativisztikus, feles spinű elektron elméletét a 2-es faktorrall együtt. A spin figyelembevétele a nemrelativisztikus számolásokban azonban mégis elengedhetetlen szimmetriát befolyásoló jelenléte és mágneses kölcsönhatásokban való részvétele miatt.]

4.5.3. A PAULI-SCHRÖDINGER EGYENLET.

Homogén mágneses térben mozgó elektron leírására a Pauli-energiaoperátor szolgál:

$$H_M = H_0 - (\mathbf{M}, \mathbf{B}), \quad \mathbf{M} = \mathbf{M}^L + \mathbf{M}^S = -\mu_B \frac{1}{\hbar} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}),$$



22.Ábra. Einstein-de Haas kísérlet.

ahol $H_0 = p^2/2m_e + V(\mathbf{r})$ az elektron kinetikus energia operátorát és más, nem a homogén mágneses térrel való kölcsönhatásból eredő potenciális energiáját jelöli.

A fenti energiaoperátor függ a spintől is, ezért az elektron állapotfüggvénye kifejtethető a két lineárisan független α és β spinfüggvény szerint:

$$\Psi(\mathbf{r}, t; \text{spin}) = \Psi_+(\mathbf{r}, t)\alpha + \Psi_-(\mathbf{r}, t)\beta,$$

ahol a kifejtési "együtthatók" éppen az elektron tér(és idő-)szerű állapotfüggvényei. Ezt a kifejtést az

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H_M \Psi$$

állapotegyenletbe helyettesítve és a koordináta rendszer z - tengelyét a külső mágneses tér irányába véve, azaz $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ -t véve, kapjuk az

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_+ &= \left(H_0 - \mu_B B \left(i \frac{\partial}{\partial \varphi} - 1 \right) \right) \Psi_+ \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_- &= \left(H_0 - \mu_B B \left(i \frac{\partial}{\partial \varphi} + 1 \right) \right) \Psi_- \end{aligned}$$

Pauli-egyenleteket, amelyek már figyelemmel vannak az elektron spinjére is.

4.5.4. A SPINOPERÁTOR IDŐBELI VÁLTOZÁSA.

Mágneses tér jelenléte esetén a spin nem mozgásállandó, mert

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H_M, \mathbf{S}] = \frac{i}{\hbar} [\mathbf{S}, (\mathbf{M}, \mathbf{B})] = \frac{i}{\hbar^2} 2\mu_B [(\mathbf{S}, \mathbf{B}), \mathbf{S}] = \frac{2i\mu_B}{\hbar^2} \frac{\hbar^2}{4} [(\vec{\sigma}, \mathbf{B}), \vec{\sigma}],$$

azaz, pl. a spin x -edik komponensének időbeli változása:

$$\begin{aligned} \frac{dS_x}{dt} &= \frac{i\mu_B}{2} [(\vec{\sigma}, \mathbf{B}), \sigma_x] = \\ &= \frac{i\mu_B}{2} \left((\sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z) \sigma_x - \sigma_x (\sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z) \right) = \\ &= \frac{i\mu_B}{2} (-2i\sigma_z B_y + 2i\sigma_y B_z) = \mu_B (\sigma_z B_y - \sigma_y B_z) = \mu_B (\mathbf{B} \times \vec{\sigma})_x = (\mathbf{M}^S \times \mathbf{B})_x. \end{aligned}$$

A mágneses tér tehát forgatónyomatékokat gyakorol a spinhez társuló mágneses momentumra, s így a spint precesszálsra kényszeríti a mágneses tér iránya körül.

5. KÖTÖTT ÁLLAPOTOK

Az előző fejezetben az energia operátorának sajátértékei és sajátfüggvényei kapcsán megemlítettük, hogy a kvantummechanika legkiterjedtebb alkalmazási területét éppen a különböző mikrofizikai rendszerek (atomok, molekulák, szilárdtestek, atommagok, stb.) energiaoperátorához tartozó sajátérték probléma – a Schrödinger egyenlet – megoldása jelenti.

A vizsgálat tárgyát képező mikrofizikai rendszerek általában **kötött állapot**ban vannak. Ez azt jelenti, hogy energiát kell befektetnünk ahhoz, hogy a rendszert alkotóelemeire bontsuk.

Kölcsönható részecskékből álló kötött állapotú rendszer *teljes alapállapot*i energiája nyilvánvalóan *negatív*, ha az energiaskála nulla pontját éppen a nemkölcsönható, elemeire bontott, nyugvó részecskékből álló rendszer energiájával definiáljuk. Ebből következik, hogy a kötött rendszer különféle gerjesztett állapotaihoz tartozó (diszkrét, v. folytonos) teljes energiák is negatívak. Beszélünk a részecskerendszer egyetlen alkotórészének energiájáról is, az ún. *egyrészecske energiáról*. Ez a fogalom azzal függ össze, hogy bizonyos esetekben a *független részecske kép*, amely szerint a rendszert alkotó részecskék egy effektív, átlagos potenciáltérben mozognak, jó közelítésnek bizonyul (ld. Hartree-Fock eljárás).

Az ún. *ionizációs* (vagy szeparációs) *energia* ahhoz szükséges, hogy a rendszer egy elemét a végtelenbe távolítsuk adiabatikusan. Amíg a rendszer teljes energiája az ionizációs küszöb (= ionizációs energia) alatt van, a gerjesztési energiák *diszkrét*ek; e felett *folytonos* az energiaspektrum, mivel van a rendszernek olyan eleme, amely energiája tetszőlegesen változhat. Szilárdtestek energiaspektrumára, amint azt később (ld. 6. fejezet) látni fogjuk, a *folytonos és tiltott energiasávok* váltakozása a jellemző. Az energiaskála nulla pontját atomok esetén szokás az ionizációs küszöbhez is rögzíteni (ld. He-atom tárgyalása, 5.3.3. pont).

Ebben a fejezetben a kötött állapotban levő sokrészecske rendszerekre vonatkozó egyenletekkel, az ún. *soktest probléma* elemeivel foglalkozunk. A megoldások csak közelítő jellegűek (jóllehet *elvben* tetszőleges pontosságúvá tehetők, amennyiben az alkotórészek közti kölcsönhatás egzaktul ismeretes). Zárt alakban csak a legegyszerűbb valós fizikai rendszerekre sikerült megoldani a Schrödinger egyenletet, amint azt az előző fejezetben láttuk. Két-, vagy több részecskét tartalmazó valós fizikai rendszer esetén a megoldást a *teljességi tétel* révén végtelen sor alakjában állíthatjuk elő és így szükségképpen közelítésekhez kell folyamodnunk.

5.1. A PAULI-ELV.

A 3.7. pontban láttuk: az azonosság elve megköveteli, hogy a hullámfüggvény azonos részecskék változóinak felcserélésével szemben szimmetrikus, vagy antiszimmetrikus legyen. Azt is megállapítottuk, hogy az állapotegyenlet őrzi a hullámfüggvény szimmetriáját. Azaz, amennyiben pl. egy azonos részecskékből álló rendszer állapotfüggvénye szimmetrikus volt egy adott időpillanatban, akkor ez a szimmetria megőrződik az idők végezetéig. Felmerül tehát a kérdés, hogy elektronokból álló részecskerendszerek (elektron)hullámfüggvénye vajon milyen szimmetriatulajdonságot mutat két elektron felcserélése esetén.

A kérdést legkönnyebben egy héliumatomhoz hasonlító, kételektronos modell segítségével válaszolhatjuk meg.

A 23. ábrának megfelelő jelöléssel a He-atom energiaoperátora a következőképpen írható:

$$H_{\text{He}}(1, 2) = H(1) + H(2) + V(1, 2), \quad (45a)$$

ahol

$$V(1, 2) = k \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (45b)$$

a két elektron (taszító) Coulomb kölcsönhatását jelenti,

$$H(i) = -\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_{\mathbf{r}_i} - k \frac{2e^2}{r_i} = -\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_{\mathbf{r}_i} - k \frac{(\sqrt{2}e)^2}{r_i} \quad (45c)$$

pedig az i -edik elektron kinetikus energiáját és a $2e$ töltésű maggal való (vonzó) Coulomb kölcsönhatását ($k = 1/4\pi\epsilon_0$).

Az említett modellproblémát úgy kapjuk, hogy az elektronok közti kölcsönhatást kikapcsoljuk: $V(1, 2) = 0$. [A modellprobléma révén a hullámfüggvény szimmetriájára nyert eredmény a valóságos esetre is igaz marad.] Az energiaoperátor két olyan "hidrogénatom" Hamilton operátorából áll, amelyben e^2 helyett $e'^2 = (\sqrt{2}e)^2$ szerepel. Így a

$$\left(H(1) + H(2) \right) \varphi_{ab}(1, 2) = E_{ab} \varphi_{ab}(1, 2)$$

Schrödinger egyenlet, azaz modellproblémánk sajátenergia értékeit azonnal felírhatjuk ($(e')^4 = 4e^4$ miatt)

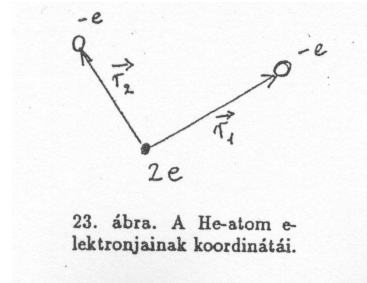
$$E_{ab} = 4E_1 \left(\frac{1}{n_a^2} + \frac{1}{n_b^2} \right) \quad (45d)$$

alakban, ahol n_a és n_b jelenti a két elektron (1 vagy 2) által elfoglalt energiaszintek kvantumszámait [$E_1 = -m_e(k e^2)^2 / 2\hbar^2 = -13,6 \text{ eV}$; $n_a, n_b = 1, 2, \dots$].

Az elektronok térbeli viselkedését jellemző $\varphi_{ab}(1, 2)$ sajátfüggvények a $H(i)$ operátor normált $\varphi_a(i)$ sajátfüggvényeiből állíthatók elő a kívánt kétféle szimmetriával:

$$\varphi_{sz}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_a(1)\varphi_b(2) + \varphi_b(1)\varphi_a(2)),$$

$$\varphi_{as}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_a(1)\varphi_b(2) - \varphi_b(1)\varphi_a(2)).$$



Alapállapotban mindkét elektron a legmélyebb állapotban van:

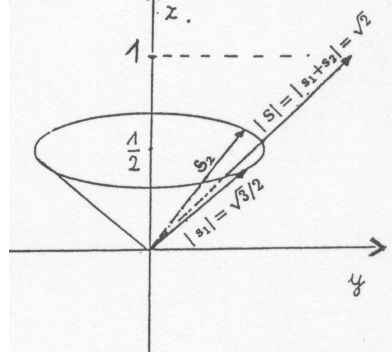
$$n_a = n_b = 1 \rightarrow \varphi_a = \varphi_b \rightarrow \varphi(1, 2) = \varphi_{sz}.$$

Azt kaptuk, hogy a hullámfüggvény térbeli (ún. "tér szerű") része *szimmetrikus* kell legyen. Azonban egy elektron nemcsak a három térbeli szabadsági fokkal rendelkezik, hanem, amint azt az előző fejezet végén láttuk, az ettől teljesen független kétféle spin szabadsági fokkal is. A (modell)probléma *teljes* hullámfüggvényének így tartalmaznia kell a kétrészecske spinfüggvényeket is:

$$\Psi(1, 2) = \varphi_{sz}(1, 2)\chi_{\ell_s}^{m_s}(1, 2).$$

A kérdés tehát az, hogy a kétrészecske spin-operátorához tartozó $\chi_{\ell_s}^{m_s}(1, 2)$ spinsajátfüggvény milyen szimmetriával rendelkezik.

Egyszerű megfontolással beláthatjuk, hogy a $\chi_{1/2}^{\pm 1/2}(i)$ egyrészecske spinfüggvényekből négy különböző kétrészecske spinfüggvény kombináció állítható elő. Ezek közül három az $\ell_s = 1$ teljes kétrészecske spinkvantumszámhoz tartozik, a három különböző $m_s = (1, 0, -1)$ spinvetület kvantumszámnak megfelelően:



$$\chi_1^1(1, 2) = \chi_{1/2}^{1/2}(1)\chi_{1/2}^{1/2}(2), \quad \chi_1^{-1}(1, 2) = \chi_{1/2}^{-1/2}(1)\chi_{1/2}^{-1/2}(2),$$

$$\chi_1^0(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_{1/2}^{1/2}(1)\chi_{1/2}^{-1/2}(2) + \chi_{1/2}^{-1/2}(1)\chi_{1/2}^{1/2}(2) \right).$$

Ezek tehát mind szimmetrikusak az $1 \leftrightarrow 2$ felcseréléssel szemben.

Az $\ell_s = m_s = 0$ -hoz tartozó egyetlen kombináció,

$$\chi_0^0(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_{1/2}^{1/2}(1)\chi_{1/2}^{-1/2}(2) - \chi_{1/2}^{-1/2}(1)\chi_{1/2}^{1/2}(2) \right),$$

viszont antiszimmetrikus.

[A (42) sajátérték egyenletek felhasználásával meggyőződhetünk arról, hogy a fenti kétrészecske spinfüggvények valóban sajátfüggvényei az $S_z = S_z(1) + S_z(2)$, ill. az $S^2 = (\mathbf{S}(1) + \mathbf{S}(2))^2$ kétrészecske spinoperátoroknak.]

A kísérletek (pl. Stern-Gerlach kísérlet) tanúbizonysága szerint a He-atom teljes pályaimpulzusmomentuma (ℓ) és teljes spinje (ℓ_s) zérus. Így a teljes $\Psi(1, 2)$ kételektron hullámfüggvény is *antiszimmetrikus*.

Pauli volt az, aki elsőként felismerte és megfogalmazta azt, hogy az előbbi eredmény általánosan igaz:

A természetben csak antiszimmetrikus elektronállapotok valósulnak meg (Pauli-elv).

[Későbbi tanulmányainkban fogjuk látni, hogy bármely típusú feles spinű azonos részecskékből álló kvantummechanikai rendszer antiszimmetrikus hullámfüggvénnyel rendelkezik; ezek a *fermionok*, amelyek a Fermi-Dirac statisztikát elégítik ki (elektron, pozitron, nukleon, stb.). A Bose-Einstein statisztikának engedelmeskedő egész spinű (azonos) részecskékből álló rendszer hullámfüggvénye két részecske felcserélésével szemben pedig szimmetrikus. Ezek a *bozonok* (foton, pion, stb).]

A Pauli-elvnek van egy másik, szemléletes megfogalmazása is:

Atomon, vagy molekulán belül két elektron sohasem fordulhat elő azonos állapotban (Pauli-féle kizárási elv).

E megfogalmazás érvényességét, amely atommagokon belüli nukleonokra is vonatkoztatható, a következőképpen láthatjuk be.

Jelöljük $"a"$ -val egy elektron atomon belüli összes kvantumszámát: $a \equiv \{n_a, \ell_a, m_{\ell_a}, s_a, m_{s_a}\}$. Ekkor a (spint is tartalmazó) $\psi_a(i)$ és $\psi_b(k)$ ($i, k = 1, 2$) egyelektron függvényekből felépíthető legáltalánosabb kételektron függvény a következő:

$$\Psi(1, 2) = c_{aa}\psi_a(1)\psi_a(2) + c_{ab}\psi_a(1)\psi_b(2) + c_{ba}\psi_b(1)\psi_a(2) + c_{bb}\psi_b(1)\psi_b(2),$$

ahol az együtthatók az illető állapot előfordulási valószínűségével kapcsolatosak. A fenti állapot akkor lesz antiszimmetrikus, azaz $\Psi(1, 2) = -\Psi(2, 1)$, ha az együtthatókat a következőképpen választjuk meg: $c_{aa} = c_{bb} = 0$, $c_{ab} = -c_{ba} = c$. Az antiszimmetritás követelményének kielégítése tehát megköveteli a $|c_{aa}|^2 = |c_{bb}|^2 = 0$ valószínűségek eltűnését, amely éppen a Pauli-féle kizárási elv fennállását jelenti.

A kapott hullámfüggvény determináns formában is felírható, mivel

$$\Psi(1, 2) = c \begin{vmatrix} \psi_a(1) & \psi_b(1) \\ \psi_a(2) & \psi_b(2) \end{vmatrix}.$$

(A c konstans a normálási feltételből lehet meghatározni.)

Eredményünket általánosíthatjuk N elektron esetére is. Általában egy N elektronból (vagy nukleonból) álló rendszer leírására jó közelítést szolgáltat az az N -részecske determináns, az ún. *Slater-determináns* hullámfüggvény, amely a spint is tartalmazó egyelektron (egynukleon) hullámfüggvényekből az ún. *spinpályákból* épül fel:

$$\Psi(1, 2, \dots, N) = c \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_2(1) & \dots & \psi_N(1) \\ \psi_1(2) & \psi_2(2) & \dots & \psi_N(2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(N) & \psi_2(N) & \dots & \psi_N(N) \end{vmatrix}. \quad (46)$$

Ez a felírási mód a szimmetria követelménynek egzaktul eleget tesz, viszont a Schrödinger egyenletet csak közelítőleg elégíti ki:

$$\left[H(1, 2, \dots, N) - E \right] \Psi(1, 2, \dots, N) \approx 0,$$

amint azt a későbbiekben fogjuk látni.

5.2. PERIÓDUSOS RENDSZER. ATOMOK

Az eddigiek elegendők ahhoz, hogy a kvantummechanika alapján kvalitatíve értelmezzük a *periódusos rendszert*, amely a fizikának és kémiának sokáig rejtélyét képezte.

Tekintsünk egy Z –rendszerű atomot, amely Z számú elektront tartalmaz (24. ábra). Az atom Hamilton operátora

$$H_Z(1, 2, \dots, Z) = \sum_{i=1}^Z H(i) + \sum_{i \neq j}^Z V(i, j)$$

alakban írható fel, ahol

$$V(i, j) = k \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

két elektron (taszító) Coulomb kölcsönhatását jelenti, míg

$$H(i) = -\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_{\mathbf{r}_i} - k \frac{Ze^2}{r_i} = -\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_{\mathbf{r}_i} - k \frac{(\sqrt{Z}e)^2}{r_i}$$

az i –edik elektron kinetikus energiáját, valamint a Ze töltésű maggal való (vonzó) Coulomb kölcsönhatását ($k = 1/4\pi\epsilon_0$). Elhanyagolva a $V(i, j)$ elektronkölcsönhatási tagot, felírhatjuk a Z rendszámú atom E_Z (közelítő) kötési energia képletét:

$$E_Z \approx Z^2 E_1 \sum_{i=1}^Z \frac{1}{n_i^2}.$$

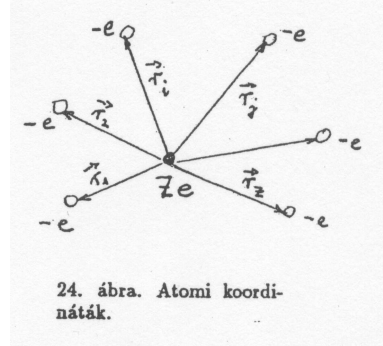
Amennyiben nem működne a Pauli-elv, és minden elektron az $n_i = 1$ –es (alap)állapotot foglalhatná el, akkor a képlet a kötési energiára monoton változást jósolna Z –ben, ellentétben a tapasztalt *periódikus* változással (25. ábra). Az atomok fizikai és kémiai tulajdonságai, így a kötési energiák is, periódikusan változnak a Z rendszám függvényében. A periódusokat lezáró elem jele, a Z rendszám és a ΔZ a következő táblázatban található:

elem	He	Ne	Ar	Kr	X	Rn
Z	2	10	18	36	54	86
ΔZ		8	8	18	18	32

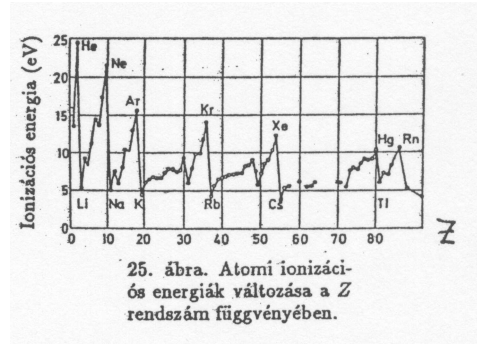
1. Táblázat

A táblázatban előforduló egész számok a Pauli-elvvel magyarázhatók: az elektronállapotokat jellemző n, ℓ, m_ℓ, m_s kvantumszám-négyesnek mindegyik elektronra különböznie kell, ezért egy *alhéj*-ban csak $2 \cdot (2\ell + 1)$ elektron tartózkodhat. Azaz egy *főhéj* elektronjainak a száma a következő képlettel számítható ki:

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} 2 \cdot (2\ell + 1) = 2 \left[2 \sum_{\ell=0}^{n-1} \ell + \sum_{\ell=0}^{n-1} 1 \right] = 2 \left[2 \frac{(n-1)n}{2} + n \right] = 2n^2.$$



24. ábra. Atomi koordináták.



Táblázatos formában:

főhéj	K	L	M	N	alhéj	s	p	d	f
n	1	2	3	4	ℓ	0	1	2	3
$2n^2$	2	8	18	32	$2 \cdot (2\ell + 1)$	2	6	10	14

2. Táblázat

Az 1. és 2. táblázatban előforduló számok hasonlósága szembeszökő, és reményt nyújt arra nézve, hogy egyedül a Pauli-elv alkalmazásával megérthetjük a periódusos rendszerben kifejeződő fizikai és kémiai szabályosságokat. Ehhez azonban még egy fizikai megjegyzést kell tennünk. A magasabb héjakban csoportosuló, valamint a magasabb impulzusmomentummal rendelkező elektronok a magtól távolabbra helyezkednek el, mint az alacsonyabb héjban levő társaik. Ennek következtében számukra az effektív magtöltés kisebb, le van árnyékolva a belső pályán mozgó társaik által. Így az egyes elektronok valójában egy $V(r) = -Ze^2/r + z_{n\ell}(r)e^2/r$ potenciáltérben mozognak, ahol a $z_{n\ell}(r)$ árnyékoló függvény állapotfüggő. Mindez azt eredményezi, hogy az elektronok energiája kismértékben az ℓ mellékkvantumszámtól is függ.

Ezek után a periódusos rendszert a következőképpen írhatjuk le. [Használjuk a 3. Táblázatot, ahol az egyes nívókon (héjakon) elhelyezkedő elektronokat sematikusan $\uparrow$, ill. $\downarrow$ jelöli a kétféle spinbeállásnak megfelelően, valamint alkalmaztuk az $(nl)^x$ jelölést is, ahol x = az elektronszámot jelenti. Vegyük igénybe a 4. Táblázat információit is.]

Első periódus: $n = 1$, $\ell = 0$. Az $(1s)$ héjban mindössze $2 \cdot 1^2 = 2$ elektron lehet. A H-atom esetén megkezdődik, és a He-atommal már le is záródik az $n = 1$ -es főhéj.

Második periódus: $n = 2$, $\ell = 0, 1$. Az $n = 2$ -es főhéjban $2 \cdot 2^2 = 8$ elektron foglalhat helyet. A héj betöltődése az energetikailag kedvezőbb helyzetet jelentő $(2s)$ alhéj betöltődésével kezdődik (Li-atom). A Be-atommal befejeződik a $(2s)$ alhéj feltöltődése, így a B-atommal megkezdődik a következő alhéj, a $(2p)$ felépülése (B, C, N, O). Az alhéjba tartozó elektronok száma a F-atom esetén öt, míg a maximális betöltöttség – 6 elektron a $(2p)$ héjon – a neon (Ne) esetén valósul meg.

Harmadik periódus: $n = 3$, $\ell = 0, 1$. Ebben a periódusban ugyanúgy 8 elem foglal helyet mint az előzőben, mivel csak az s és p alhéj töltődik be. A periódus Na-mal kezdődik, Mg-mal folytatódik, ahol a $3s$ alhéj telítetté válik. Ezután a $3p$ alhéj feltöltődésével folytatódik a periódus (Al, Si, P, S), amelynek utolsó előtti eleme a halogének csoportjába tartozó klór (Cl), míg az utolsó a nemesgáz argon (Ar).

Negyedik periódus: $n = 4$, $\ell = 0$; $n = 3$, $\ell = 2$. Ebben a periódusban előbb az energetikailag kedvezőbb $4s$ héj töltődik be: K, Ca. Ezután folytatódik a még üres $(3d)$ alhéj feltöltődése a szkandiummal (Sc); az alhéj fokozatos betöltődése olyan fontos fémeket ad, mint a Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn. Ezután a $4p$ héj következik. A periódus utolsó előtti eleme a halogén Br, az utolsó a nemesgáz Kr.

Hasonló módon épül föl az 5. periódus, amelyben először az $(5s)$ héj töltődik be (Rb, Sr), majd folytatódik a $(4d)$ héj feltöltődése (Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh), amely a Pd-mal záródik. Ez utóbbi elem mégsem nemesgáz, mivel a $(4d)$ héj a közelfekvő $(5s)$ szint miatt nem stabilis, más elektronokkal való kölcsönhatása révén könnyen átrendeződik (ld. 4. Táblázat). A periódus utolsó előtti eleme a jód (J, vagy I), amelyben egy elektron hiányzik ahhoz, hogy az $(5p)$ héj teljesen betöltődjön. A betöltődés a nemesgáz xenonnal (Xe) valósul meg.

A 6. periódusban a $(6s)$, $(5d)$, valamint a $(6p)$ héjak töltődnek fel, kezdve az alkáli fém típusú céziummal (Cs), folytatódva a földfémekhez tartozó báriummal (Ba), utolsó előtti elemként az antimonnal (At), végén pedig a nemesgáz típusú emanációval (Em), vagy másnéven radonnal (Rn). Az $(5f)$ és $(5g)$ pályák üresen maradnak a magas impulzusmomentumhoz tartozó szintek magas energiaszükséglete miatt.

A 7. periódus összes elemét nem ismerjük, mivel az idetartozó elemek atommagjai nagy töltésük miatt instabilak. Mindenesetre a $(7s)$ héj töltődik fel az első oszlopba tartozó franciummal (Fr), és a második oszlopba tartozó rádiummal (Ra). Ezután az $(5f)$ héj feltöltődése indul be: Ac, Th, Pa, U, Np, Pu, Am, stb.

Mármost könnyen megérthetjük a periódusos rendszer bizonyos jellegzetességeit. A nemesgázok *lezárt* elektronkonfigurációval rendelkeznek, ezért nem mutatnak vegyülésre hajlandóságot, még önmagukkal sem. A nemesgázok (He, Ne, Ar, Kr, X) atomos állapotban vannak.

n=1, $\ell=0$	$\uparrow$					$\uparrow\downarrow$
2	(1s)					(1s) ²
2	H					He
n=2, $\ell=0,1$	$\uparrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow$	...	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$
n=1, $\ell=0$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	...	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
8	(2s) ¹	(2s) ²	(2s) ² (2p) ¹	...	(2s) ² (2p) ⁵	(2s) ² (2p) ⁶
2	(1) ²	(1) ²	(1) ²	...	(1) ²	(1) ²
10	Li	Be	B	...	F	Ne
n=3, $\ell=0,1$	$\uparrow$	$\uparrow\downarrow$	...	...	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$
n=2, $\ell=0,1$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	...	...	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$
n=1, $\ell=0$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	...	...	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
8	(3s)	(3s) ²			(3s) ² (3p) ⁵	(3s) ² (3p) ⁶
10	(1) ² (2) ⁸	(1) ² (2) ⁸	...	...	(1) ² (2) ⁸	(1) ² (2) ⁸
18	Na	Mg	...	...	Cl	Ar
n=4, $\ell=0,1$	$\uparrow$	$\uparrow\downarrow$	...	...	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$
n=3, $\ell=2$			$\uparrow$	...	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$
n=3, $\ell=0,1$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	...	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$
n=2, $\ell=0,1$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	...	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$
n=1, $\ell=0$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	...	...	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
8	(4s) ¹	(4s) ²	(4s) ²	...	(4s) ² (4p) ⁵	(4s) ² (4p) ⁶
8+10	(3) ⁸	(3) ⁸	(3) ⁸ (3d) ¹	...	(3) ¹⁸	(3) ¹⁸
10	(1) ² (2) ⁸	(1) ² (2) ⁸	(1) ² (2) ⁸	...	(1) ² (2) ⁸	(1) ² (2) ⁸
36	K	Ca	Sc	...	Br	Kr
	alkáli fémek	földfémek	...	...	halogének	nemesgázok

3. Táblázat

Az első oszlopba tartozó alkáli fémeknek {nemesgáz + külső elektron} szerkezete van. Ezért érthető, hogy heves reakciókra képes az utolsó előtti oszlopban álló halogénnel, amelyeknek viszont eggyel kevesebb elektronjuk van a nemesgáz konfigurációhoz képest. (Sók képződnek.)

Az alkáli *fémek* nevüket annak köszönhetik, hogy könnyen leadható külső elektronnal rendelkeznek. Mint későbbi tanulmányainkban látni fogjuk, a fémes jelleggel azok az elemek rendelkeznek, amelyek le tudnak adni egy vagy két elektront a vezetési sávba. A második oszlopba tartozó *kétvegyértékű* földfémek már *két* elektronjuk révén tudnak vegyületet képezni.

Az *egy*vegyértékű halogének *egy* elektron felvételével az energetikailag kedvezőbb nemesgáz konfiguráció kialakítására törekednek. Az elektronfelvétel nemfémes jelleget kölcsönöz ezen utolsó előtti oszlopba tartozó elemeknek (a halogének gáz-, ill. folyadék állapotban fordulnak elő).

Ezek után könnyen megérthetjük a kvantummechanikai tanulmányunkban eddig előfordult nevezetes elemek tulajdonságait, amelyeket elektronszerkezetük határoz meg.

Az Einstein-de Haas kísérletben megismert vasatom (Fe) elektronszerkezete:

$$\frac{(4s)^2}{(3s)^2(3p)^6(3d)^6} \frac{(2s)^2(2p)^6}{(1s)^2}$$

Pontos kvantummechanikai számítások megmutatták, hogy a nem lezárt $3d$ pályán levő hat elektron $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow$ -ként helyezkedik el, s ebből következik a teljes spin $\ell_s = 1$ -es értéke, amely a vas mágnesezhetőségét lehetővé teszi (vö. Hund-szabály).

Másik példa a Stern-Gerlach kísérletben előforduló ezüst (Ag-) atom elektronszerkezete, amely a következőképpen írható fel:

$$(1)^2(2)^8(3)^{18}(4s)^2(4p)^6(4d)^{10}(5s)^1.$$

A teljes pályaimpulzusmomentum zérus, a teljes spin viszont $\ell_s = 1/2$, amelynek értékét a legkülső pályán levő egyetlen elektron határozza meg.

Az a tény, hogy rendszámban egymáshoz közel álló elemek teljesen eltérő fizikai és kémiai tulajdonságot mutatnak, míg egymástól nagyon különböző rendszámú elemek hasonló fizikai és kémiai tulajdonsággal rendelkeznek, a fizikának és kémiának sokáig megoldatlan rejtélye volt. A periódusos rendszer (ld. 4. Táblázat) értelmezését méltán tarthatjuk a kvantummechanika egyik diadalaként számon. A rendezőelv, mint láttuk a Pauli-elv volt, amely az azonosság elvéből fakadt. Ezért kimondhatjuk, hogy a részecskék megkülönböztethetlensége nem tudásunk hiányos voltát tükrözi, hanem a természet egyik törvényét fejezi ki. A Pauli-elvnek nagy szerepe van a kémiai kötés, a telítettség, valamint a vegyértékek létrejöttében, ill. magyarázatában.

Alkáli fémek		Elem ^Z Alapállapotú konfiguráció 2s+1 L _J										Kalko- gének		Halo- gének		Nemes- gázok			
I	H ¹ 1s 2S _{1/2}	Alkáli földfémek														He ² 1s ² 1S ₀			
II	Li ³ 1s ² 2s 2S _{1/2}	Be ⁴ 1s ² 2s ² 1S ₀													Ne ¹⁰ 2p ⁶ 1S ₀				
III	Na ¹¹ 3s 2S _{1/2}	Mg ¹² 3s ² 1S ₀	Nemes- fémek												Ar ¹⁸ 3s ² 3p ⁶ 1S ₀				
IV	K ¹⁹ 4s 2S _{1/2}	Ca ²⁰ 4s ² 1S ₀	Sc ²¹ 4s ² 3d 2D _{3/2}	Ti ²² 4s ² 3d ² 3F ₂	V ²³ 4s ² 3d ³ 4F _{3/2}	Cr ²⁴ 4s ² 3d ⁵ 7S ₃	Mn ²⁵ 4s ² 3d ⁵ 6S _{5/2}	Fe ²⁶ 4s ² 3d ⁶ 5D ₄	Co ²⁷ 4s ² 3d ⁷ 4F _{9/2}	Ni ²⁸ 4s ² 3d ⁸ 3F ₄	Cu ²⁹ 4s ² 3d ¹⁰ 2S _{1/2}	Zn ³⁰ 4s ² 3d ¹⁰ 1S ₀	Ga ³¹ 4s ² 3d ¹⁰ 4p 2P _{1/2}	Ge ³² 4s ² 3d ¹⁰ 4p ² 3P ₀	As ³³ 4s ² 3d ¹⁰ 4p ³ 4S _{3/2}	Se ³⁴ 4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁴ 3P ₂	Br ³⁵ 4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁵ 2P _{3/2}	Kr ³⁶ 4s ² 4p ⁶ 1S ₀	
V	Rb ³⁷ 5s 2S _{1/2}	Sr ³⁸ 5s ² 1S ₀	Y ³⁹ 5s ² 4d 2D _{3/2}	Zr ⁴⁰ 5s ² 4d ² 3F ₂	Nb ⁴¹ 5s ² 4d ⁴ 6D _{5/2}	Mo ⁴² 5s ² 4d ⁵ 7S ₃	Tc ⁴³ 5s ² 4d ⁵ 6S _{5/2}	Ru ⁴⁴ 5s ² 4d ⁶ 5F ₅	Rh ⁴⁵ 5s ² 4d ⁷ 4F _{9/2}	Pd ⁴⁶ 4d ¹⁰ 1S ₀	Ag ⁴⁷ 5s ² 4d ¹⁰ 2S _{1/2}	Cd ⁴⁸ 5s ² 4d ¹⁰ 1S ₀	In ⁴⁹ 5s ² 4d ¹⁰ 5p 2P _{1/2}	Sn ⁵⁰ 4d ¹⁰ 5p ² 3P ₀	Sb ⁵¹ 4d ¹⁰ 5p ³ 4S _{3/2}	Te ⁵² 4d ¹⁰ 5p ⁴ 3P ₂	I ⁵³ 4d ¹⁰ 5p ⁵ 2P _{3/2}	Xe ⁵⁴ 5s ² 5p ⁶ 1S ₀	
VI	Cs ⁵⁵ 6s 2S _{1/2}	Ba ⁵⁶ 6s ² 1S ₀	La ⁵⁷ 6s ² 5d 2D _{3/2}	Hf ⁷² 6s ² 5d ² 3F ₂	Ta ⁷³ 6s ² 5d ³ 4F _{3/2}	W ⁷⁴ 6s ² 5d ⁴ 5D ₀	Re ⁷⁵ 6s ² 5d ⁵ 6S _{5/2}	Os ⁷⁶ 6s ² 5d ⁶ 5D ₄	Ir ⁷⁷ 6s ² 5d ⁷ 4F _{9/2}	Pt ⁷⁸ 6s ² 5d ⁸ 3D ₃	Au ⁷⁹ 6s ² 5d ¹⁰ 2S _{1/2}	Hg ⁸⁰ 6s ² 5d ¹⁰ 1S ₀	Tl ⁸¹ 6s ² 5d ¹⁰ 6p 2P _{1/2}	Pb ⁸² 6p ² 3P ₀	Bi ⁸³ 6p ³ 4S _{3/2}	Po ⁸⁴ 6p ⁴ 3P ₂	At ⁸⁵ 6p ⁵ 2P _{3/2}	Rn ⁸⁶ 6p ⁶ 1S ₀	
VII	Fr ⁸⁷ 7s 2S _{1/2}	Ra ⁸⁸ 7s ² 1S ₀																	
Lantanidák (Ritka földfémek)			La ⁵⁷ 6s ² 5d 2D _{3/2}	Ce ⁵⁸ 6s ² 5d4f 3H ₅	Pr ⁵⁹ 6s ² 4f ³ 4I _{3/2}	Nd ⁶⁰ 6s ² 4f ⁴ 5I ₄	Pm ⁶¹ 6s ² 4f ⁵ 6H _{5/2}	Sm ⁶² 6s ² 4f ⁶ 7F ₀	Eu ⁶³ 6s ² 4f ⁷ 8S _{7/2}	Gd ⁶⁴ 6s ² 5d4f ⁷ 9D ₂	Tb ⁶⁵ 6s ² 5d4f ⁸ 9D ₂	Dy ⁶⁶ 6s ² 4f ¹⁰ 6S _{7/2}	Ho ⁶⁷ 6s ² 4f ¹¹ 6S _{7/2}	Er ⁶⁸ 6s ² 4f ¹² 6S _{7/2}	Tm ⁶⁹ 6s ² 4f ¹³ 2F _{7/2}	Yb ⁷⁰ 6s ² 4f ¹⁴ 1S ₀	Lu ⁷¹ 6s ² 5d4f ¹⁴ 2D _{3/2}		
Aktinidák			Ac ⁸⁹ 7s ² 6d 2D _{3/2}	Th ⁹⁰ 7s ² 6d ² 5L ₆	Pa ⁹¹ 6d5f ² 5L ₆	U ⁹² 6d5f ³ 5L ₆	Np ⁹³ 5f ⁶ 5F ₅	Pu ⁹⁴ 5f ⁶ 8S _{7/2}	Am ⁹⁵ 5f ⁷ 8S _{7/2}	Cm ⁹⁶ 6d5f ⁷ 8S _{7/2}	Bk ⁹⁷ 5f ⁹ 8S _{7/2}	Cf ⁹⁸ 5f ¹⁰ 5F ₅	Es ⁹⁹ 5f ¹¹ 5F ₅	Fm ¹⁰⁰ 5f ¹² 5F ₅	Mv ¹⁰¹ 5f ¹³ 5F ₅				

4. Táblázat. Az elemek periódusos rendszere

5.3.

KÉTTEST

PROBLÉMA. DEUTÉRIUM. IDŐTŐL FÜGGETLEN PERTURBÁCIÓSZÁMÍTÁS. A HÉLIUMATOM

5.3.1. A hidrogénatom mint kétttest probléma. A deutérium.

Az előző fejezetben tárgyalt H-atom probléma megoldásánál kismértékű hibát követtünk el: a proton tömegét végtelennek vettük azáltal, hogy az elektron mozgását leíró koordináta rendszer középpontját hozzá rögzítettük. Valójában a proton véges tömegű, így az elektron kismértékben befolyásolja mozgását az elektromos kölcsönhatás révén. A koordináta rendszert a közös tömegközépponthoz kell rögzítenünk, vagy egy inerciarendszer egy fix pontjához. A 26. ábra ez utóbbi esetet mutatja be egy általános, m_1, m_2 tömegű kétrészecske problémára.

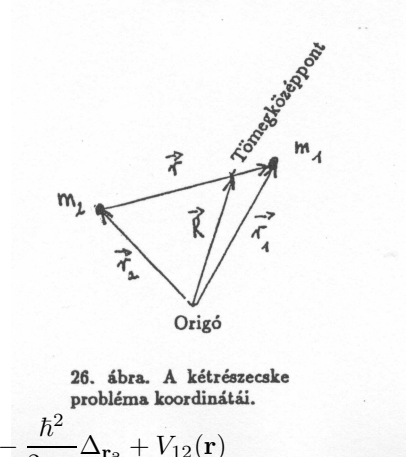
Definiáljuk a tömegközépponti és relatív helyvektort:

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2,$$

valamint a teljes és redukált tömeget:

$$M = m_1 + m_2, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

A kétrészecske rendszer teljes Hamiltonija ezek után így írható:



$$\begin{aligned} H_{tot} &= T_1 + T_2 + V_{12} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_{\mathbf{r}_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_{\mathbf{r}_2} + V_{12}(\mathbf{r}) \\ &= T_{cm}(\mathbf{R}) + H_{rel}(\mathbf{r}) \equiv -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}} + V_{12}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

T_{cm} csak $\mathbf{R}$ -től függ és a tömegközéppont translációját írja le; ez az operátor a kétrészecske kötési energiájához nem ad járulékot. Két részecskéből álló rendszer belső állapotát s így a kialakuló energianívókat H_{rel} szabja meg. Specializálva H-atomra ($m_1 = m_p, m_2 = m_e, V_{12} = -ke^2/r$), a proton visszalökődésére is figyelemmel levő

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}} - k \frac{e^2}{r} \right) \psi_{nlm} = E_n \psi_{nlm}$$

hidrogénatom Schrödinger egyenlet a korábban tárgyalttól mindössze abban tér el, hogy az m_e elektrontömeg helyett az ettől csak kismértékben különböző

$$\mu = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{m_p}} = \frac{m_e}{1 + \frac{1}{1836}} = \frac{m_e}{1,0005}$$

redukált tömeg áll. Így az energiasajátértékek $E_n = E_1/n^2$, $n = 1, 2, \dots$ képletében E_1 kifejezése is $E_1 = -\mu e^4 k^2 / 2\hbar^2$ -re módosul. 1932-ben Urey a H-atom Balmer-sorozatának tanulmányozása közben észrevette, hogy a vonalaknak gyenge kísérőik vannak; a gyenge és erős vonalak frekvenciáinak arányára

$$\frac{\nu_{gyenge}}{\nu_{erős}} = \frac{1,00025}{1,0005} = \frac{1 + \frac{m_e}{2m_p}}{1 + \frac{m_e}{m_p}}$$

összefüggést kapta. Ebből arra következtetett, hogy a H-gázban csekély mennyiségben előfordul olyan H-atom is, amelynek magja dupla tömeggel rendelkezik. Urey így fedezte fel a *deutériumot*.

5.3.2. AZ IDŐTŐL FÜGGETLEN (SCHRÖDINGER-FÉLE) PERTURBÁCIÓSZÁMÍTÁS

A közelítő módszerek közül kiemelkedően fontos a perturbációszámítás. Alkalmazására akkor van lehetőség, amikor a H Hamilton operátor két részre bontható,

$$H = H_0 + V,$$

egy ún. nemperturbált részre, amelynek megoldása ismert:

$$(H_0 - E_k^{(0)})\psi_k^{(0)} = 0, \quad k = 1, 2, \dots,$$

valamint egy V perturbációra, amelynek hatása "gyenge". Amennyiben a perturbáció időtől függ, az időtől függő (ún. Dirac-féle) perturbációszámításról beszélünk (ld. 7. fejezet).

Ebben az alfejezetben olyan perturbációkkal foglalkozunk, amelyek nem függenek az időtől. Ezt a fajta közelítő számítást első kidolgozójáról Schrödinger-féle perturbációszámításnak nevezzük. Két esetet különböztetünk meg aszerint, hogy a perturbálatlan probléma elfajult, vagy nem elfajult.

A) A perturbálatlan probléma nem elfajult.

Célunk a teljes Schrödinger egyenlet

$$(H - E_k)\psi_k = 0, \quad k = 1, 2, \dots,$$

megoldásának előállítása a nemperturbált $\psi_k^{(0)}$ megoldások teljes rendszere szerint. (Végig feltesszük, hogy ez a rendszer diszkrét, jöllehet folytonos spektrum esetére is érvényesek a megállapítások.) Ennek érdekében bevezetünk egy $0 \leq \lambda \leq 1$ valós paramétert s az eredeti probléma helyett a $H(\lambda) = H_0 + \lambda V$ módosított probléma

$$(H_0 + \lambda V - E_k(\lambda))\psi_k(\lambda) = 0, \quad k = 1, 2, \dots$$

megoldását tekintjük.

A Schrödinger-féle perturbációszámítás *alapfeltevése* az, hogy az $E_k(\lambda)$ energia és a $\psi_k(\lambda)$ megoldás analitikus függvénye a λ (csatolási) állandónak és így ezek hatványsorba fejthetők λ szerint:

$$E_k(\lambda) = E_k^{(0)} + \lambda E_k^{(1)} + \lambda^2 E_k^{(2)} + \dots$$

$$\psi_k(\lambda) = \psi_k^{(0)} + \lambda \psi_k^{(1)} + \lambda^2 \psi_k^{(2)} + \dots$$

($\lambda = 0$ esetén nyilván a nemperturbált megoldásokat kapjuk, $\lambda = 1$ esetén pedig a keresett probléma megoldásait, amelyek a perturbáció "gyengesége" folytán konvergensek.) Helyettesítsük be ezt a sorfejtést a fenti Schrödinger egyenletbe!

$$[H_0 - E_k^{(0)} + \lambda(V - E_k^{(1)}) - \lambda^2 E_k^{(2)} - \lambda^3 E_k^{(3)} - \dots][\psi_k^{(0)} + \lambda \psi_k^{(1)} + \lambda^2 \psi_k^{(2)} + \dots] = 0, \\ k = 1, 2, \dots$$

Tetszőleges λ -ra az egyenlet akkor elégíthető ki, ha λ minden hatványának együtthatója zérus:

$$\lambda^0 : (H_0 - E_k^{(0)})\psi_k^{(0)} = 0, \quad k = 1, 2, \dots \quad (47a)$$

$$\lambda^1 : (H_0 - E_k^{(0)})\psi_k^{(1)} + (V - E_k^{(1)})\psi_k^{(0)} = 0, \quad k = 1, 2, \dots \quad (47b)$$

$$\lambda^2 : (H_0 - E_k^{(0)})\psi_k^{(2)} + (V - E_k^{(1)})\psi_k^{(1)} - E_k^{(2)}\psi_k^{(0)} = 0, \quad k = 1, 2, \dots \quad (47c)$$

$$\lambda^3 : (H_0 - E_k^{(0)})\psi_k^{(3)} + (V - E_k^{(1)})\psi_k^{(2)} - E_k^{(2)}\psi_k^{(1)} - E_k^{(3)}\psi_k^{(0)} = 0, \quad k = 1, 2, \dots \quad (47d)$$

$$\dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots$$

$$\lambda^n : (H_0 - E_k^{(0)})\psi_k^{(n)} + (V - E_k^{(1)})\psi_k^{(n-1)} - E_k^{(2)}\psi_k^{(n-2)} - \dots - E_k^{(n)}\psi_k^{(0)} = 0, \quad k = 1, 2, \dots \quad (47e)$$

Ezek azok az egyenletek, amelyek különböző rendben szukcesszíve meghatározzák az energiát, ill. a hullámfüggvényt. A nulladik rend, (47a) egyenlet, például azonosan megegyezik a nemperturbált problémával, amelyet ismerünk. A (47b) egyenletből az elsőrendű korrekciót kapjuk és így tovább. Ahhoz, hogy a megoldásokhoz lépésről-lépésre eljussunk, ki kell használni azt a tényt, hogy a nemperturbált megoldások, valamint a teljes megoldások (orto)normáltak:

$$\langle \psi_k^{(0)} | \psi_l^{(0)} \rangle = \delta_{kl}, \quad k, l = 1, 2, \dots$$

$$\langle \psi_k | \psi_k \rangle = 1 \quad k = 1, 2, \dots$$

Mármint ahhoz, hogy a $\{\psi_k \rightarrow \psi_k^{(0)}, \text{ miközben } \lambda \rightarrow 0\}$ követelmény teljesüljön, a ‘kereszt-normát’ a következőképpen definiáljuk:

$$\langle \psi_k^{(0)} | \psi_k \rangle = 1 \quad k = 1, 2, \dots$$

Ebből viszont azonnal következik, hogy a különböző rendű megoldások a nemperturbált megoldásra ortogonálisak (összhangban azzal, hogy a különböző λ hatványok együtthatóinak el kell tűnnie):

$$\langle \psi_k^{(0)} | \psi_k^{(i)} \rangle = 0, \quad i = 1, 2, \dots \quad k = 1, 2, \dots$$

Ezek kihasználásával kaphatjuk meg a különböző korrekciókat. Pl. az elsőrendűt úgy, hogy (47b)-t balról beszorozzuk $\psi_k^{(0)*}$ -gal és integráljuk a változók szerint. Az így nyert

$$\langle \psi_k^{(0)} | (H_0 - E_k^{(0)})\psi_k^{(1)} \rangle + \langle \psi_k^{(0)} | (V - E_k^{(1)})\psi_k^{(0)} \rangle = 0,$$

egyenletből az első tag eltűnése miatt (H_0 hermitikus!) az elsőrendű energiakorrekció képlete:

$$E_k^{(1)} = \langle \psi_k^{(0)} | V \psi_k^{(0)} \rangle.$$

Másrészt $j \neq k$ esetén a $\psi_j^{(0)*}$ -gal képezett matrixelem összefüggésből:

$$\langle \psi_j^{(0)} | (H_0 - E_k^{(0)})\psi_k^{(1)} \rangle + \langle \psi_j^{(0)} | (V - E_k^{(1)})\psi_k^{(0)} \rangle = 0, \quad (j \neq k)$$

azaz az

$$(E_j^{(0)} - E_k^{(0)}) \langle \psi_j^{(0)} | \psi_k^{(1)} \rangle + \langle \psi_j^{(0)} | V \psi_k^{(0)} \rangle = 0, \quad (j \neq k)$$

egyenletből a nullad- és elsőrendű megoldások átfedésére kapjuk:

$$c_{jk}^{(1)} \equiv \langle \psi_j^{(0)} | \psi_k^{(1)} \rangle = \frac{\langle \psi_j^{(0)} | V \psi_k^{(0)} \rangle}{E_k^{(0)} - E_j^{(0)}}, \quad (j \neq k).$$

Ezek az átfedési (ill. kifejtesi együtthatók) felhasználhatók a hullámfüggvény elsőrendű korrekciójának meghatározására. Ez utóbbi ui. kifejthető a $\psi_j^{(0)}$ -k teljes rendszere szerint:

$$\psi_k^{(1)} = \sum_j c_{jk}^{(1)} \psi_j^{(0)} = c_{kk}^{(1)} \psi_k^{(0)} + \sum_{j \neq k} c_{jk}^{(1)} \psi_j^{(0)}.$$

Az ismeretlen $c_{kk}^{(1)}$ együtthatót $\psi_k^{(1)}$ normáltsága rögzíti.

A hullámfüggvény első rendig korrekt kifejezése tehát ($\lambda = 1$):

$$\psi_k = \psi_k^{(0)} + \psi_k^{(1)} = (1 + c_{kk}^{(1)}) \psi_k^{(0)} + \sum_{j \neq k} \frac{\langle \psi_j^{(0)} | V \psi_k^{(0)} \rangle}{E_k^{(0)} - E_j^{(0)}} \psi_j^{(0)} \quad (48a)$$

Az energia elsőrendig korrekt kifejezése pedig:

$$E_k = E_k^{(0)} + E_k^{(1)} = E_k^{(0)} + \langle \psi_k^{(0)} | V \psi_k^{(0)} \rangle. \quad (48b)$$

B) A perturbálatlan probléma elfajult

Abban az esetben, ha a perturbálatlan probléma k -adik szintje p -szeresen elfajult azaz

$$(H_0 - E_k^{(0)})\psi_{k\alpha}^{(0)} = 0, \quad k = 1, 2, \dots, \quad \alpha = 1, 2, \dots, p,$$

az előző megfontolások kismértékű változtatással érvényben maradnak. Az eredeti probléma helyett most is a $H(\lambda) = H_0 + \lambda V$ módosított problémát oldjuk meg,

$$(H_0 + \lambda V - E_{k\alpha}(\lambda))\psi_{k\alpha}(\lambda) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, \quad \alpha = 1, 2, \dots, p.$$

($\lambda = 0$ esetén nyilván a p -szeresen elfajult nemperturbált megoldásokat kapjuk, $\lambda = 1$ esetén pedig, mint látni fogjuk, a keresett probléma már nem elfajult megoldásait.)

Az $E_{k\alpha}(\lambda)$ energiát és a $\psi_{k\alpha}(\lambda)$ megoldást (a perturbáció gyengesége folytán konvergens) hatványsorba fejtjük a λ csatolási állandó szerint:

$$E_{k\alpha}(\lambda) = E_k^{(0)} + \lambda E_{k\alpha}^{(1)} + \lambda^2 E_{k\alpha}^{(2)} + \dots$$

$$\psi_{k\alpha}(\lambda) = \psi_{k\alpha}^{(0)} + \lambda \psi_{k\alpha}^{(1)} + \lambda^2 \psi_{k\alpha}^{(2)} + \dots$$

Ezt a sorfejtést a megoldandó Schrödinger egyenletbe helyettesítve a

$$[H_0 - E_k^{(0)} + \lambda(V - E_{k\alpha}^{(1)}) - \lambda^2 E_{k\alpha}^{(2)} - \lambda^3 E_{k\alpha}^{(3)} - \dots][\psi_{k\alpha}^{(0)} + \lambda \psi_{k\alpha}^{(1)} + \lambda^2 \psi_{k\alpha}^{(2)} + \dots] = 0, \\ k = 1, 2, \dots, \quad \alpha = 1, 2, \dots, p$$

összefüggést kapjuk. A " λ minden hatványának együtthatója zérus" feltételből nyerjük:

$$\lambda^0 : (H_0 - E_k^{(0)})\psi_{k\alpha}^{(0)} = 0, \quad k = 1, 2, \dots, \quad \alpha = 1, 2, \dots, p, \quad (49a)$$

$$\lambda^1 : (H_0 - E_k^{(0)})\psi_{k\alpha}^{(1)} + (V - E_{k\alpha}^{(1)})\psi_{k\alpha}^{(0)} = 0, \quad k = 1, 2, \dots, \quad \alpha = 1, 2, \dots, p, \quad (49b)$$

$$\lambda^2 : (H_0 - E_k^{(0)})\psi_{k\alpha}^{(2)} + (V - E_{k\alpha}^{(1)})\psi_{k\alpha}^{(1)} - E_{k\alpha}^{(2)}\psi_{k\alpha}^{(0)} = 0, \\ k = 1, 2, \dots, \quad \alpha = 1, 2, \dots, p \quad (49c)$$

$$\lambda^3 : (H_0 - E_k^{(0)})\psi_{k\alpha}^{(3)} + (V - E_{k\alpha}^{(1)})\psi_{k\alpha}^{(2)} - E_{k\alpha}^{(2)}\psi_{k\alpha}^{(1)} - E_{k\alpha}^{(3)}\psi_{k\alpha}^{(0)} = 0, \\ k = 1, 2, \dots, \quad \alpha = 1, 2, \dots, p \quad (49d)$$

...

$$\lambda^n : (H_0 - E_k^{(0)})\psi_{k\alpha}^{(n)} + (V - E_{k\alpha}^{(1)})\psi_{k\alpha}^{(n-1)} - E_{k\alpha}^{(2)}\psi_{k\alpha}^{(n-2)} - \dots - E_{k\alpha}^{(n)}\psi_{k\alpha}^{(0)} = 0, \\ k = 1, 2, \dots, \quad \alpha = 1, 2, \dots, p \quad (49e)$$

A nulladik rend itt is azonosan megegyezik a nemperturbált problémával.

A (49b) egyenletből az elsőrendű korrekciót úgy kapjuk, hogy balról beszorozzuk $\psi_{k\alpha'}^{(0)*}$ -gal és integráljuk a változók szerint. A kapott egyenlet

$$\langle \psi_{k\alpha'}^{(0)} | (H_0 - E_k^{(0)})\psi_{k\alpha}^{(1)} \rangle + \langle \psi_{k\alpha'}^{(0)} | (V - E_{k\alpha}^{(1)})\psi_{k\alpha}^{(0)} \rangle = 0, \quad k = 1, 2, \dots, \quad \alpha, \alpha' = 1, 2, \dots, p$$

első tagja eltűnik H_0 hermitikussága miatt, a második tag pedig a következő összefüggést szolgáltatja az elsőrendű energiakorrekció meghatározására:

$$E_{k\alpha}^{(1)}\delta_{\alpha\alpha'} = \langle \psi_{k\alpha'}^{(0)} | V \psi_{k\alpha}^{(0)} \rangle, \quad k = 1, 2, \dots, \quad \alpha, \alpha' = 1, 2, \dots, p.$$

Ez $\alpha = \alpha'$ esetén akkor határozza meg az energiakorrekciót, ha $\alpha \neq \alpha'$ esetén egyben $\langle \psi_{k\alpha}^{(0)} | V \psi_{k\alpha}^{(0)} \rangle = 0$ is teljesül. Azaz, ha a V perturbáció matrixelemei diagonálisak a perturbálatlan probléma $\psi_{k\alpha}^{(0)}$ ($k = \text{fix}, \alpha = 1, 2, \dots, p$) sajátfüggvényeinek alterében.

Ez általában nem szokott teljesülni a rendelkezésre álló perturbálatlan megoldások esetén, viszont egy uniter transzformációval mindig található egy olyan bázis, amelyben V diagonális. Jelöljük ezt a bázist felülvonással, azaz

$$\bar{\psi}_{k\alpha}^{(0)} = \sum_{\alpha'=1}^p a_{\alpha\alpha'} \psi_{k\alpha'}^{(0)}, \quad \alpha = 1, 2, \dots, p$$

már az a transzformált bázis, amelyre egyrészt kikötjük az ortonormalitást:

$$\begin{aligned} \delta_{\alpha\alpha'} &= \langle \bar{\psi}_{k\alpha}^{(0)} | \bar{\psi}_{k\alpha'}^{(0)} \rangle = \sum_{\alpha'', \alpha'''=1}^p a_{\alpha\alpha''}^* a_{\alpha'\alpha'''} \langle \psi_{k\alpha''}^{(0)} | \psi_{k\alpha'''}^{(0)} \rangle \\ &= \sum_{\alpha''=1}^p a_{\alpha\alpha''}^* a_{\alpha'\alpha''} = \sum_{\alpha''=1}^p a_{\alpha\alpha''}^* a_{\alpha''\alpha'}^T, \end{aligned}$$

(amely eredmény mátrix alakban felírt formájából látszik legkönnyebben, hogy az $\mathbf{a}$ mátrix uniter: $\mathbf{I} = \mathbf{a}^* \mathbf{a}^T \rightarrow \mathbf{a}^* = (\mathbf{a}^T)^{-1}$: unitaritási feltétel), másrészt megköveteljük, hogy a potenciál-mátrix diagonális legyen:

$$\begin{aligned} E_{k\alpha}^{(1)} \delta_{\alpha\alpha'} &= \langle \bar{\psi}_{k\alpha}^{(0)} | V \bar{\psi}_{k\alpha'}^{(0)} \rangle = \sum_{\alpha'', \alpha'''=1}^p a_{\alpha\alpha''}^* a_{\alpha'\alpha'''} \langle \psi_{k\alpha''}^{(0)} | V \psi_{k\alpha'''}^{(0)} \rangle \\ &= \sum_{\alpha'', \alpha'''=1}^p a_{\alpha\alpha''}^* V_{k\alpha'', k\alpha'''} a_{\alpha'''\alpha'}^T, \end{aligned}$$

ahol bevezettük a

$$V_{k\alpha'', k\alpha'''} = \langle \psi_{k\alpha''}^{(0)} | V \psi_{k\alpha'''}^{(0)} \rangle$$

jelölést a potenciál-matrixra. Mátrix alakba írva (és elhagyva a k állapotindexet) kapjuk az áttekinthetőbb

$$\mathbf{E}^{(1)} = \mathbf{a}^* \mathbf{V} \mathbf{a}^T$$

egyenletet, amely az $\mathbf{a}^* = (\mathbf{a}^T)^{-1}$ uniter-feltétel kihasználásával

$$\mathbf{a}^T \mathbf{E}^{(1)} = \mathbf{V} \mathbf{a}^T$$

formába írható, azaz (továbbra is elhagyva a fix k indexet, és emlékezve arra, hogy $\mathbf{E}^{(1)}$ diagonális) a

$$\sum_{\alpha'=1}^p V_{\alpha\alpha'} a_{\alpha''\alpha'} - E_{\alpha''}^{(1)} a_{\alpha''\alpha} = 0, \quad \alpha, \alpha'' = 1, 2, \dots, p \quad (50a)$$

homogén lineáris egyenlet rendszert kaptuk az ismeretlen $a_{\alpha\alpha'}$ együttható-mátrix meghatározására. Ennek triviálistól különböző megoldása akkor van, ha a

$$D = \begin{vmatrix} V_{11} - E_{\alpha}^{(1)} & V_{12} & \dots & V_{1p} \\ V_{21} & V_{22} - E_{\alpha}^{(1)} & \dots & V_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{p1} & V_{p2} & \dots & V_{pp} - E_{\alpha}^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \quad \alpha = 1, 2, \dots, p \quad (k = \text{fix}) \quad (50b)$$

ún. *szekuláris determináns* eltűnik. Ez a feltétel elegendő a p -számú (nem feltétlen különböző) $E_{k\alpha}^{(1)}$ energiakorrekció meghatározására, amely révén a teljes energia elsőrendig korrekt értéke

$$E_{k\alpha} = E_k^{(0)} + E_{k\alpha}^{(1)}, \quad \alpha = 1, 2, \dots, p. \quad (50c)$$

A hullámfüggvény elsőrendű korrekcióját az uniter transzformációnak alávetett, teljes rendszert képező nemperturbált probléma sajátfüggvényei szerinti kifejtéssel

$$\psi_{k\alpha}^{(1)} = \sum_{j\alpha'} c_{k\alpha,j\alpha'}^{(1)} \bar{\psi}_{j\alpha'}^{(0)}, \quad k = 1, 2, \dots, \quad \alpha = 1, 2, \dots, p$$

határozhatjuk meg a fentebb vázolt módon. E kifejtést behelyettesítve a $\bar{\psi}_{k\alpha}^{(0)}$ -al felírt (49b)-be, majd balról $\psi_{l\alpha''}^{(0)*}$ -gal ($l \neq k$) beszorozva és integrálva a változókra, az ismeretlen $c_{k\alpha,j\alpha'}^{(1)}$ együtthatókra a

$$c_{k\alpha,j\alpha'}^{(1)} = \frac{\langle \psi_{k\alpha}^{(0)} | V \psi_{j\alpha'}^{(0)} \rangle}{E_j^{(0)} - E_k^{(0)}}, \quad (k \neq j)$$

képletet nyerjük, amely révén a hullámfüggvény elsőrendig korrekt alakja a következő:

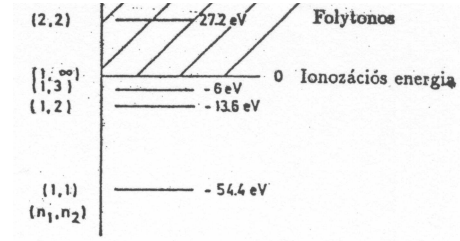
$$\psi_{k\alpha} = \bar{\psi}_{k\alpha}^{(0)} + \psi_{k\alpha}^{(1)} = (1 + c_{k\alpha;k\alpha}^{(1)}) \bar{\psi}_{k\alpha}^{(0)} + \sum_{j \neq k} \sum_{\alpha'}^p \frac{\langle \psi_{k\alpha}^{(0)} | V \psi_{j\alpha'}^{(0)} \rangle}{E_j^{(0)} - E_k^{(0)}} \bar{\psi}_{j\alpha'}^{(0)}. \quad (50d)$$

Itt $c_{k\alpha;k\alpha}^{(1)}$ a normálásból határozható meg.

Az elsőrendű korrekciók gyakran elegendő felvilágosítással szolgálnak a perturbáció okozta effektusokról.

5.3.3. A HÉLIUMATOM.

Az 5.1. fejezetben a Pauli-elv kapcsán az elektronkölcsönhatás figyelembevétele nélkül tárgyaltuk a He-atom alapállapotát. Ebben az alfejezetben az elektronkölcsönhatást a perturbációs számítás első rendjében fogjuk figyelembe venni az energiameghatározás céljából, valamint felírjuk a teljes nulladrendű hullámfüggvényt. Mindenekelőtt azonban egy pillantást vetünk a 27. ábrára, ahol az elektronkölcsönhatás nélküli "He-atom" spektruma látható.



27. ábra. A He-atom spektruma az elektronkölcsönhatás kikapcsolásakor.

Az (1,1) állapot a (térből szimmetrikus) alapállapot. Ez 4-szeres hidrogénatom alapállapot energiával rendelkezik, amennyiben az energiaskála zérus pontját az (1,∞) első ionizációs küszöbnél vesszük fel. Első ionizációs küszöbnek hívjuk azt az energiát, amelynél az egyik elektron kiszabadul a kötött állapotból és átkerül szórás állapotba. Ettől kezdve az atom energiája folytonos, és ebbe a folytonos spektrumrészbe ágyazódnak be a másik, még kötött állapotban levő elektron diszkrét nívói. Ezekről a *kontínuumbeli kötött állapotokról* elektron-He⁺-ion szórás kísérletekből szerezhetünk tudomást.

Jóllehet a spektrum főbb jellegzetességeit ez az egyszerűsített modell visszaadja, a valódi energiaséma az elektronkölcsönhatás miatt módosul. Írjuk fel a He-atom energiaoperátorát a

$$H_{\text{He}} = H_0 + V$$

formában (ld. 5.1. fejezet, (45a–c) egyenletek, és 23. ábra), ahol a "perturbálatlan" operátor, amelynek sajátérték problémája ismeretes,

$$H_0 = H(1) + H(2)$$

alakban írható, ahol

$$H(i) = -\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_{\mathbf{r}_i} - k \frac{(\sqrt{2}e)^2}{r_i}, \quad i = 1, 2,$$

a perturbációt okozó operátor pedig az elektronok taszító kölcsönhatásából adódik:

$$V = k \frac{e^2}{r}, \quad (r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|, \quad k = 1/4\pi\epsilon_0).$$

A H_0 perturbálatlan probléma a kicserélődés következtében kétszeresen elfajult ($p = 2$). Ez azt jelenti, hogy a $(H_0 - E_k^{(0)})\psi_{k\alpha}^{(0)} = 0$ sajátérték egyenlet két ($\alpha = 1, 2 \equiv p$) lineárisan független megoldással rendelkezik, amelyek mindegyikéhez ugyanaz az $E_k^{(0)}$ nemperturbált energia tartozik. A nemperturbált megoldások $\varphi_a(i)$ hidrogénszerű függvények szorzatából építhetők fel, és mind $\psi_{k1}^{(0)}(1, 2) = \varphi_a(1)\varphi_b(2)$, mind $\psi_{k2}^{(0)}(1, 2) = \varphi_a(2)\varphi_b(1)$ megoldás, ugyanazon $E_k^{(0)} = E_a + E_b = 4E_1(1/n_a^2 + 1/n_b^2)$ sajátértékekkel ($E_1 = -13,6 \text{ eV}$). A perturbálatlan probléma általános megoldása ezek lineárkombinációiból fog állni:

$$\overline{\psi}_{k\alpha}^{(0)}(1, 2) = a_{\alpha 1}\psi_{k1}^{(0)}(1, 2) + a_{\alpha 2}\psi_{k2}^{(0)}(1, 2), \quad \alpha = 1, 2,$$

ahol a normalizációs feltétel miatt az együtthatókra fennáll az

$$a_{\alpha 1}^2 + a_{\alpha 2}^2 = 1, \quad \alpha = 1, 2$$

megszorítás.

Az elektronkölcsönhatás energiát módosító hatását elsőrendű perturbációszámítással vesszük figyelembe, amelynek egyenletei ($V_{ij} = \langle \psi_{ki}^{(0)} | V \psi_{kj}^{(0)} \rangle$, $i, j = 1, 2$)

$$a_{\alpha 1}(V_{11} - E_{\alpha}^{(1)}) + a_{\alpha 2}V_{12} = 0,$$

$$a_{\alpha 1}V_{21} + a_{\alpha 2}(V_{22} - E_{\alpha}^{(1)}) = 0,$$

(50b) alapján meghatározzák mind az ismeretlen $a_{\alpha 1}, a_{\alpha 2}$ együtthatókat, mind az elsőrendű energiakorrekciót: $E_{\alpha}^{(1)} \equiv E_{k\alpha}^{(1)} \simeq E_{k\alpha} - E_k^{(0)} = E_{k\alpha} - E_a - E_b$ ($\alpha = 1, 2$; $E_{k\alpha}$ pedig a k -ik állapot egzakt energiáját jelenti). A fenti homogén lineáris algebrai egyenletrendszer triviálistól különböző megoldásait akkor kapjuk meg, ha a

$$D = \begin{vmatrix} V_{11} - E_{\alpha}^{(1)} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - E_{\alpha}^{(1)} \end{vmatrix}, \quad \alpha = 1, 2$$

szekuláris determináns eltűnik.

Észrevéve, hogy

$$V_{11} = V_{22} \equiv C = ke^2 \int \frac{|\varphi_a(\mathbf{r}_1)|^2 |\varphi_b(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \approx 34\text{eV}$$

az elektronok töltéeloszlásából származó *Coulomb*-kölcsönhatási energia, valamint a

$$V_{12} = V_{21} \equiv K = ke^2 \int \frac{\varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b^*(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 > 0$$

matricelemek a klasszikus analógiával nem rendelkező ún. *kicserélődési* kölcsönhatás következtében jönnek létre, $D = 0$ -ból következik $(C - E_{\alpha}^{(1)})^2 = K^2$, azaz

$$E_{k\alpha}^{(1)} = E_{\alpha}^{(1)} = C \pm K, \quad \rightarrow \quad a_{11} = +a_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}; \quad a_{21} = -a_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Azt kaptuk, hogy a V perturbáció a K kicserélődési kölcsönhatás révén feloldotta a Pauli elv okozta degenerációt, s így a k -ik állapot első rendig korrekt energiája két szintre, az

$$E_{k1} = E_k^{(0)} + E_{k1}^{(1)} = E_a + E_b + C + K, \quad (\text{para}) \quad (51a)$$

$$E_{k2} = E_k^{(0)} + E_{k2}^{(1)} = E_a + E_b + C - K, \quad (\text{orto}) \quad (51b)$$

képlet szerint felhasadt. Az állapotok ennek megfelelően szétválnak egy szimmetrikus

$$\overline{\psi}_{k1}^{(0)}(1, 2) = \varphi_{sz}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_a(1)\varphi_b(2) + \varphi_b(1)\varphi_a(2)), \quad (\text{para}, \quad S = 0, \quad \text{szinglett})$$

és egy antiszimmetrikus

$$\overline{\psi}_{k2}^{(0)}(1, 2) = \varphi_{as}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_a(1)\varphi_b(2) - \varphi_b(1)\varphi_a(2)). \quad (\text{orto}, \quad S = 1, \quad \text{triplett})$$

térszerű résszel rendelkező részre. A Pauli-elv miatt az előbbihez antiszimmetrikus ($S = 0$) spinfüggvény, az utóbbihoz szimmetrikus ($S = 1$) kétrészecske spinfüggvény társul. Mivel a (mágneses nyomatekuk révén megvalósuló) spin-spin kölcsönhatás két elektron között kicsi, átmenet a *szingulett* ($S = 0$) állapotból a *triplett* ($S = 1$) állapotba ritkán valósul meg. Ezért kezdetben a héliumgázt két különálló komponensből összetett gáznak gondolták a spektroszkópusok és *orto*-, ill. *para*-héliumnak nevezték el ezt a két típust (orto-hélium az ($S = 1$) spintriplett).

A héliumatom teljes (nulladrendű) hullámfüggvénye tehát a következő analitikus formában írható fel:

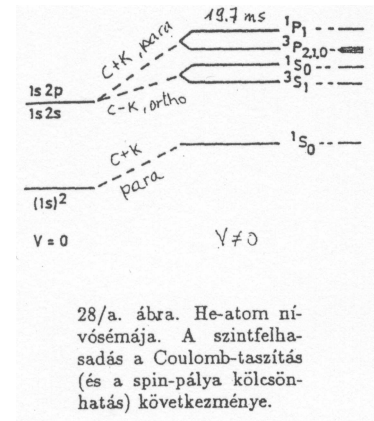
$$\psi_{He}^{orto}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_a(1)\varphi_b(2) - \varphi_b(1)\varphi_a(2) \right) \begin{cases} \chi_{1/2}^{1/2}(1)\chi_{1/2}^{1/2}(2) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_{1/2}^{1/2}(1)\chi_{1/2}^{-1/2}(2) + \chi_{1/2}^{-1/2}(1)\chi_{1/2}^{1/2}(2) \right) \\ \chi_{1/2}^{-1/2}(1)\chi_{1/2}^{-1/2}(2) \end{cases} \quad (52a)$$

és

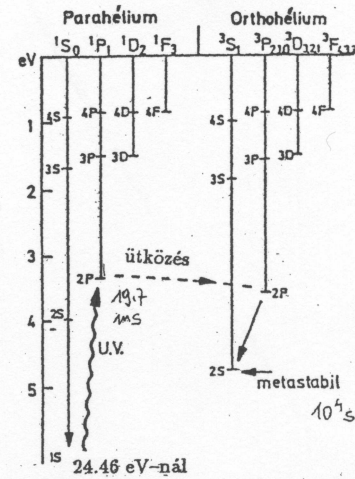
$$\psi_{He}^{para}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_a(1)\varphi_b(2) + \varphi_b(1)\varphi_a(2) \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_{1/2}^{1/2}(1)\chi_{1/2}^{-1/2}(2) - \chi_{1/2}^{-1/2}(1)\chi_{1/2}^{1/2}(2) \right) \quad (52b)$$

Az, hogy az eredetileg elfajult energianívók milyen irányba tolódnak el, természetesen C és K előjelétől és nagyságától függ. A C Coulomb integrál *pozitív*, mivel az integrandusz pozitív. (Fizikailag is ezt várjuk.) A K kicserélődési integrál nagysága a $\varphi_a\varphi_b$ egyrészecske állapotok átfedésétől függ: az (egyrészecske) alapállapot ($n_a = 1$) és egy magasan gerjesztett (egyrészecske) állapot esetén ($n_b = \text{nagy}$) nyilván kicsi lesz az (n_a, n_b) kétrészecske szinthez tartozó K kicserélődési energia. Explicit számolások megmutatják, hogy az alacsonyan fekvő nívókra ($n_a, n_b \sim 1, 2, \dots$) K is *pozitív*, és valamivel *kisebb* C -nél. A legmélyebben fekvő alapállapot *para-hélium* (ld. 28.a ábra, ahol a $^{2S+1}L_J$ jelölés alkalmazzuk a kételektron állapot jellemzésére; S, L, J a megfelelő $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$, $\mathbf{L} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2$, $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ operátorokhoz tartozó kvantumszámok). (Orto alapállapot nem valósul meg a természetben, ld. 5.1. pont.) Az első gerjesztett $E_1 + E_2$ szint felhasad egy $E_1 + E_2 + C + K$ *para*- és egy $E_1 + E_2 + C - K$ *orto*-hélium állapotra. Ez utóbbi metastabil $10^4 s$ élettartammal, mivel alapállapotba való átmenete kiválasztási szabályok által (ld. 7. fejezet) első rendben tiltott. [Az első gerjesztett para-nívó is metastabil $\tau = 19.7 ms$ élettartammal.]

Megjegyezzük még, hogy para-héliumból orto-héliumot elektronbombázással lehet előállítani. Az átmenet az $(1s, 2p)$ első gerjesztett állapoton keresztül megy végbe (28.b ábra). Ez a folyamat az atmoszférában spontán következik be. A gázok orto-, ill. para-állapotainak fontos szerepük van a lézereknél.



28/a. ábra. He-atom nívósémája. A szintfelhasadás a Coulomb-taszítás (és a spin-pálya kölcsönhatás) következménye.



28/b. ábra. He-atom nívósémája. Parahélium-orto-hélium átmenet a $2P$ állapoton keresztül történhet. (A triplett 3P , 3D és 3F állapotok további három szintre hasadnak a spin-pálya kölcsönhatás miatt.)

5.4. VARIÁCIÓS ELV. RITZ ELJÁRÁS. HARTREE-FOCK EGYENLETEK. ÖNKONZISZTENS ELJÁRÁS.

5.4.1. VARIÁCIÓS ELV ÉS A SCHRÖDINGER EGYENLET . A RITZ-FÉLE VARIÁCIÓS MÓDSZER.

Legyen ψ egy tetszőleges négyzetesen integrálható és korlátos függvény, H pedig a rendszer Hamilton operátora.

Állítás: Bármely olyan ψ állapotvektor, amelyre az

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | H \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \text{stac.}$$

funkcionál (H átlagértéke) stacionárius, kielégíti a

$$H\psi = E\psi \quad (E = E[\psi])$$

Schrödinger egyenletet.

Bizonyítás: ψ^* szerint variálva nyerjük:

$$\begin{aligned} 0 = \delta E &= \frac{\langle \delta \psi | H \psi \rangle \langle \psi | \psi \rangle - \langle \psi | H \psi \rangle \langle \delta \psi | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle^2} \\ &= \frac{\langle \delta \psi | H \psi \rangle - \langle \delta \psi | \frac{\langle \psi | H \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \\ &= \frac{\langle \delta \psi | \{H - E[\psi]\} \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = 0. \end{aligned}$$

Ebből pedig, $\delta \psi^*$ tetszőleges volta miatt:

$$H\psi = E\psi, \quad (E = E[\psi]), \quad QED.$$

Hasonló eredményre jutunk, ha a következő mellékfeltételes variációs feladatot tekintjük:

$$F[\psi] = \langle \psi | H \psi \rangle = \text{stac.}, \quad \text{ha} \quad \langle \psi | \psi \rangle = 1.$$

Lagrange-féle multiplikátor módszerrel a feladat a

$$\delta \left(F + \lambda [\langle \psi | \psi \rangle - 1] \right) = 0$$

variáció eltűnéseként fogalmazható meg, ahol a $\lambda = -E$ jelölést fogjuk használni a Lagrange multiplikátorra. A variálás a

$$0 = \delta \left(\langle \psi | H \psi \rangle - E[\langle \psi | \psi \rangle - 1] \right) = \langle \delta \psi | (H - E) \psi \rangle = 0$$

egyenletre vezet, amelyből $H\psi = E\psi$ következik.

Ritz-féle minimumelv tétele: Az $E[\psi]$ funkcionál minimummal rendelkezik a $\psi = \psi_0$ alapállapotú függvényt pontban, azaz

$$E[\psi] \geq E_0, \quad \psi \in L^2.$$

Bizonyítás: Minthogy H sajátfüggvény rendszere teljes, szerinte bármely ψ reguláris hullámfüggvény kifejezhető:

$$\psi = \sum_{i=0,1,\dots} c_i \psi_i, \quad \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}.$$

Ezért

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | H \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\sum_i |c_i|^2 E_i}{\sum_i |c_i|^2} \geq \frac{E_0 \sum_i |c_i|^2}{\sum_i |c_i|^2} = E_0.$$

Egyenlőséget csak $\psi = \psi_0$, azaz $|c_0| = 1, c_i = 0, i = 1, 2, \dots$ esetén kapunk. *QED.* Azaz a Ritz-féle funkcionál felülről közelíti az alapállapot energiát. Megjegyzendő, hogy a tétel általánosítható az E_n gerjesztett állapotra vonatkozó minimum elv megadására is.

Variációs *módszer* használható minden olyan esetben, amikor a megoldandó egyenletek egy variációs *elvből* származtathatók le.

A *Ritz-féle variációs módszer* a Schrödinger egyenlet fenti variációs elvekből való leszámaztatását használja ki. Tartalmazza a próbahullámfüggvény N számú (kifejtési) paramétert: $\psi = \psi(a_1, a_2, \dots, a_N)$. Behelyettesítve az $E[\psi] = \min$. Ritz-féle funkcionálba, E -nek az ismeretlen (kifejtési) paraméterektől való közönséges függvényét nyerjük:

$$E[\psi] = E(a_1, a_2, \dots, a_N) = \min,$$

amelyből a differenciálással kapott

$$\frac{\partial E}{\partial a_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

egyenletrendszerből meghatározhatjuk az a_i együtthatókat. Ezeket visszahelyettesítve ψ -be, ill. $E[\psi]$ -be, megkapjuk az alapállapot közelítő hullámfüggvényét, ill. energiáját. Megjegyzendő, hogy matrixelméleti tételek felhasználásával *Hylleraas és Undheim* 1930-ban azt is bizonyította, hogy a paraméterek számát növelve a számított energiaértékek *monoton* csökkennek: $E(a_1, a_2, \dots, a_N) \geq E(a_1, a_2, \dots, a_N, a_{N+1}) \geq \dots \geq E_0$. Szemléletesen fogalmazva, ez azt jelenti, hogy egy variációs módszeren alapuló kötöttállapot alapenergia számolást nem lehet "elrontani". Nagyobb bázist választva a számított alapállapot energiája értéke csak javulhat (csökkenhet) vagy stagnálhat.

Mint láttuk, a Ritz-féle minimum elv (és Hylleraas-Undheim tétel is részben) azon alapult, hogy a H nemrelativisztikus energiaoperátor alulról korlátos, a H sajátérték spektrumjának van egy legkisebb értéke, nevezetesen a (kötött) alapállapot energiája.

Nem létezik hasonló tétel a (nemkötött) szórési állapotok esetére. Ezzel függ össze az, hogy a szóráselméleti számolások módszere, technikája változatosabb. Megjegyzendő még, hogy a relativisztikus energiaoperátor sem korlátos alulról (ld. 8. fejezet), ezért a Ritz módszert ott csak nagy körültekintéssel lehet használni.

5.4.2. L-S és j-j CSATOLÁS.

Mielőtt az egyik leggyakrabban használt soktestprobléma módszer ismertetésére térnénk át, szükséges megtárgyalnunk röviden a sokrészecske rendszert alkotó részecskék pálya- és spin-impulzusmomentumából adódó teljes $\mathbf{J}$ impulzusmomentum előállításának kétféle lehetőségét.

Mint láttuk, töltött részecskék pályamomentumuk, valamint saját impulzusmomentumuk (spinjük) révén mágneses momentummal rendelkeznek. Ez a kétféle mágneses momentum kölcsönhatásban

áll egymással, amit a $V = -(\mathbf{M}^L, \mathbf{M}^S) = -2\mu_B^2(\mathbf{l}, \mathbf{s})$ potenciállal jellemezhetünk. Ilyen értelemben beszélünk spin- és pálya-impulzusmomentum közti kölcsönhatásról. Amennyiben az egyes részecskék spinje és pálya-impulzusmomentuma között erős a kölcsönhatás (mint pl. az atommagok nukleonjai, illetve a magas rendszámú atomok esetén), úgy az ún. *j-j csatolás* jön létre, azaz a sokrészecske hullámfüggvény teljes impulzusmomentumát megadó $\mathbf{J}$ vektor (és z -irányú vetülete, J_z) a következőképpen áll elő:

$$\mathbf{J} = \sum_i \mathbf{j}_i, \quad \mathbf{j}_i = \mathbf{l}_i + \mathbf{s}_i.$$

Másik lehetőség az ún. *L-S csatolás*, amelynél a teljes impulzusmomentum a részecskék teljes pályaimpulzusmomentumából, ill. teljes spinjéből áll össze:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad \mathbf{L} = \sum_i \mathbf{l}_i, \quad \text{és} \quad \mathbf{S} = \sum_i \mathbf{s}_i.$$

5.4.3. Impulzusmomentum összeadási szabályok.

Legyen $\mathbf{l}$ és $\mathbf{s}$ két impulzusmomentum operátor, amelyek egymással felcserélhetők: $[l_i, s_j] = 0$ (ahol a továbbiakban a közhasznú $(i, j, k) = (1, 2, 3) \equiv (x, y, z)$ jelölést használjuk az indexelésre). Ilyen operátor egy atomi elektron pályaimpulzusmomentuma és spinje. Természetesen $[l_i, l_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}l_k$ és $[s_i, s_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}s_k$.

Ezért $\mathbf{j}=\mathbf{l}+\mathbf{s}$ esetén $[j_i, j_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}j_k$ következik.

Bizonyítás:

$$[j_1, j_2] = (\ell_1 + s_1)(\ell_2 + s_2) - (\ell_2 + s_2)(\ell_1 + s_1) = \ell_1\ell_2 - \ell_2\ell_1 + s_1s_2 - s_2s_1 = i\hbar(\ell_3 + s_3) = i\hbar j_3.$$

(És hasonlóan a többi komponensre.)

Így $\mathbf{j}$ spektrumát a következő sajátérték egyenletek szolgáltatják:

$$\mathbf{j}^2 \eta_j^{m_j} = \hbar^2 j(j+1) \eta_j^{m_j} \quad \text{és} \quad j_3 \eta_j^{m_j} = \hbar m_j \eta_j^{m_j}.$$

Feladatunk az, hogy $\mathbf{l}$ és $\mathbf{s}$ sajátfüggvényeiből felépítsük $\mathbf{j}=\mathbf{l}+\mathbf{s}$ sajátfüggvényeit.

Tekintsük $\mathbf{l}$ és $\mathbf{s}$ sajátérték egyenletét:

$$\mathbf{l}^2 \eta_\ell^{m_\ell} = \hbar^2 \ell(\ell+1) \eta_\ell^{m_\ell} \quad \text{és} \quad l_3 \eta_\ell^{m_\ell} = \hbar m_\ell \eta_\ell^{m_\ell},$$

$$\mathbf{s}^2 \eta_s^{m_s} = \hbar^2 s(s+1) \eta_s^{m_s} \quad \text{és} \quad s_3 \eta_s^{m_s} = \hbar m_s \eta_s^{m_s}.$$

A $\mathbf{j}$ operátor harmadik komponensére, $j_z = j_3$ -ra vonatkozó sajátértékegyenlet könnyen kielégíthető olyan sajátfüggvénnyel, amely az $\mathbf{l}$ és $\mathbf{s}$ sajátfüggvényeinek egyszerű szorzata:

$$j_3 \eta_\ell^{m_\ell} \eta_s^{m_s} = (l_3 + s_3) \eta_\ell^{m_\ell} \eta_s^{m_s} = \hbar(m_\ell + m_s) \eta_\ell^{m_\ell} \eta_s^{m_s} \equiv \hbar m_j \eta_\ell^{m_\ell} \eta_s^{m_s},$$

tehát a vetület kvantumszám $m_j = m_\ell + m_s$ -nek adódik.

$\mathbf{j}^2$ sajátfüggvényei általában már nem állíthatók elő a fenti egyszerű szorzat sajátfüggvény alakban,

$$j^2 \eta_\ell^{m_\ell} \eta_s^{m_s} \neq j(j+1) \eta_\ell^{m_\ell} \eta_s^{m_s} \quad (\text{általában}),$$

viszont ezek lineárkombinációjaként próbálkozhatunk előállításukkal.

Legyen tehát

$$\eta_j^{m_j} = \sum_{m_\ell, m_s} C(\ell m_\ell s m_s | j m_j) \eta_\ell^{m_\ell} \eta_s^{m_s} \quad (53)$$

már sajátfüggvénye $\mathbf{j}^2$ -nek. (j_3 -nak biztosan sajátfüggvénye $m_j = m_\ell + m_s$ sajátérték mellett.)

Az (53) egyenletben szereplő együtthatókat Clebsch-Gordan együtthatóknak hívjuk (értékeit táblázatokban megtalálhatjuk, de az alábbi gondolatmenet alapján ki is számíthatjuk).

Feladat a j kvantumszámok és a C együtthatók meghatározása. A felcserélési törvények alapján tudjuk: $\max j = \max m_j$. Azaz $\max j = \max(m_\ell + m_s) = \ell + s$. Az ehhez tartozó Clebsch-Gordan koefficienst könnyen meghatározhatjuk. Ugyanis $j = \ell + s$ esetén $m_\ell = \ell$, $m_s = s$, és így az (53)-beli összegzés elesik. Tehát

$$\eta_j^j = C(\ell s s | j j) \eta_\ell^\ell \eta_s^s.$$

Bizonyítjuk, hogy ez $\mathbf{j}^2$ operátor sajátfüggvénye.

$$\begin{aligned} \mathbf{j}^2 \eta_j^j &= C(\ell s s | j j) (\mathbf{1} + \mathbf{s})^2 \eta_\ell^\ell \eta_s^s = \\ &C(\ell s s | j j) [\mathbf{l}^2 + \mathbf{s}^2 + (l_- s_+ + l_+ s_-) + 2l_3 s_3] \eta_\ell^\ell \eta_s^s = \\ &C(\ell s s | j j) [\ell(\ell + 1) + s(s + 1) + (0 + 0) + 2\ell s] \eta_\ell^\ell \eta_s^s = \\ &C(\ell s s | j j) [(\ell + s)(\ell + s + 1)] \eta_\ell^\ell \eta_s^s = \\ &C(\ell s s | j j) j(j + 1) \eta_\ell^\ell \eta_s^s = j(j + 1) \eta_j^j. \end{aligned}$$

(A bizonyítás során felhasználtuk a 4.3.4 pont eredményeit.)

$C(\ell s s | j j)$ értékét a normálásból határozhatjuk meg:

$$1 = \langle \eta_j^j | \eta_j^j \rangle = C^2 \langle \eta_\ell^\ell \eta_s^s | \eta_\ell^\ell \eta_s^s \rangle = C^2 \langle \eta_\ell^\ell | \eta_\ell^\ell \rangle \langle \eta_s^s | \eta_s^s \rangle = C^2,$$

amiből $C(\ell s s | j j) = 1$ következik (konvenció szerint a pozitív előjelet választjuk).

A maximális j és m_j kvantumszámmal rendelkező $\eta_{j=\ell+s}^{j=\ell+s} = \eta_\ell^\ell \eta_s^s$ állapotból a többi $\eta_{\ell+s}^{m_j}$ állapot az $l_- + s_-$ léptető operátor ismételt alkalmazásával nyerhető. Pl. az $\eta_{\ell+s}^{\ell+s-1}$ állapotot az $a_1 \eta_\ell^\ell \eta_s^{s-1} + a_2 \eta_\ell^{\ell-1} \eta_s^s$ kifejezés fogja adni, ahol az együtthatók a normálási és az előző állapotra vonatkozó ortogonalitási feltételből határozhatók meg.

Az $\eta_{\ell+s}^{\ell+s-1}$ állapotra ortogonális kombináció adja $\eta_{\ell+s-1}^{\ell+s-1}$ -et, amiből $l_- + s_-$ ismételt alkalmazásával az összes $\eta_{\ell+s-1}^m$ sajátfüggvény előállítható. És így tovább.

Határozzuk most meg azt a minimális j -t, amely még ℓ és s kombinációjából kiadódhat! Tudjuk, hogy összesen $(2\ell + 1)(2s + 1)$ darab lineárisan független $\eta_\ell^{m_\ell} \eta_s^{m_s}$ szorzatfüggvény van és ezekből akarjuk felépíteni a $2j + 1$ darab $\eta_j^{m_j}$ függvényt, ahol $j = \ell + s, \ell + s - 1, \dots, j_0 = \min j$. Mivel a lineárisan független függvények száma meg kell egyezzen mindkét oldalon,

$$(2\ell + 1)(2s + 1) = \sum_{j=j_0}^{\ell+s} (2j + 1) = (\ell + s + 1 - j_0)(\ell + s + 1 + j_0),$$

azaz

$$j_0^2 = (\ell - s)^2 \quad \rightarrow \quad j_0 = |\ell - s|.$$

Tehát végeredményben az összeg impulzusmomentum kvantumszámaira $\ell + s \geq j \geq |\ell - s|$ kiválasztási szabály adódott, ami a vektorok összeadási szabályára emlékeztet bennünket, s ezért azzal könnyen memorizálható.

Megjegyzendő, hogy három impulzusmomentum összegzésénél fellépő együtthatókat $6 - j$ vagy Racah-, a négy impulzusmomentum összeadásánál előforduló együtthatókat $9 - j$ vagy Wigner-szimbólumoknak nevezzük.

5.4.4. A HARTREE-FOCK MÓDSZER.

A) HARTREE MÓDSZERE.

Tekintsünk egy zárt héjú kvantummechanikai sokrészecske rendszert (pl. egy nemesgáz atomot), amelynek energiaoperátora a

$$\begin{aligned} H &= - \sum_i \left(\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_{\mathbf{r}_i} + k \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i>j} k \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \\ &\equiv \sum_i H_0(\mathbf{r}_i) + \sum_{i>j} V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \end{aligned} \quad (54)$$

alakban írható. (Az összegzések ebben az alfejezetben 1-től N -ig mennek.)

Hartree a következőképpen írta fel a rendszer közelítő (alapállapot) hullámfüggvényét:

$$\Psi(1, 2, \dots, N) = \psi_1(1)\psi_2(2) \cdots \psi_N(N), \quad (55a)$$

ahol az egyrészecske hullámfüggvények az ún spinpályák, amelyek tartalmazzák a spin-hullámfüggvényt is:

$$\psi_i(i) = \varphi_i(\mathbf{r}_i)\chi_i(m_{s_i}), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (55b)$$

ahol az $(i = 1, 2, \dots, N)$ egyrészecske állapotok mind különbözők (és ortogonálisak egymásra) a Pauli-elv legalább részbeni kielégítése miatt. Az (55a) felírás azonban nyilvánvalóan nem antiszimmetrikus.

Az (55a) hullámfüggvényt a Ritz-féle variációs módszerrel határozzuk meg a

$$\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle = 1 \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (55c)$$

normálási mellékfeltétel figyelembevételével. A variációs funkcionál tehát a következő:

$$\begin{aligned} F[\Psi] &= \langle \Psi | H \Psi \rangle - \sum_i \varepsilon_i (\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle - 1) = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \cdots d\mathbf{r}_N \\ &\varphi_1^*(\mathbf{r}_1)\varphi_2^*(\mathbf{r}_2) \cdots \varphi_N^*(\mathbf{r}_N) \left[\sum_i H_0(\mathbf{r}_i) + \sum_{i>j} V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right] \varphi_1(\mathbf{r}_1)\varphi_2(\mathbf{r}_2) \cdots \varphi_N(\mathbf{r}_N) \\ &- \sum_i \varepsilon_i \left(\int d\mathbf{r}_i \varphi_i^*(\mathbf{r}_i)\varphi_i(\mathbf{r}_i) - 1 \right), \end{aligned} \quad (56a)$$

ahol ε_i -k a Lagrange paraméterek és kihasználtuk, hogy az (54) Hamilton operátor nem függ a spintól, a spinfüggvények pedig ortonormáltak. Bevezetve az $\mathbf{r} = \mathbf{r}_i$, $\mathbf{r}' = \mathbf{r}_j$ jelölést, az F funkcionál a következőképpen írható tovább:

$$F[\Psi] = \sum_i \left\{ \int d\mathbf{r} \left[\varphi_i^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_{\mathbf{r}} - k \frac{Ze^2}{r} - \varepsilon_i \right) \varphi_i(\mathbf{r}) \right] + \varepsilon_i \right\} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_j^*(\mathbf{r}') k \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi_i(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}'). \quad (56b)$$

Mármost kihasználva az ismert

$$\frac{\delta G[\varphi_i(\mathbf{r}')] }{\delta \varphi_j(\mathbf{r})} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{G[\varphi_i(\mathbf{r}') + \epsilon \delta_{ij} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] - G[\varphi_i(\mathbf{r}')] }{\epsilon}$$

funkcionálderiválási összefüggést, amely szerint, ha

$$G[\{\varphi_i^*(\mathbf{r}')\}, i = 1, 2, \dots] = \sum_i \int d\mathbf{r}' \varphi_i^*(\mathbf{r}') H(\mathbf{r}') \varphi_i(\mathbf{r}'),$$

akkor

$$\begin{aligned} \frac{\delta G[\varphi_i^*(\mathbf{r}')] }{\delta \varphi_j^*(\mathbf{r})} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{1}{\epsilon} G[\varphi_i^*(\mathbf{r}') + \epsilon \delta_{ij} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] - \frac{1}{\epsilon} G[\varphi_i^*(\mathbf{r}')] \right) = \\ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \sum_i \int d\mathbf{r}' \left(\varphi_i^*(\mathbf{r}') + \epsilon \delta_{ij} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right) H(\mathbf{r}') \varphi_i(\mathbf{r}') - \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \sum_i \int d\mathbf{r}' \varphi_i^*(\mathbf{r}') H(\mathbf{r}') \varphi_i(\mathbf{r}') &= \\ H(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}), \end{aligned}$$

könnyen el tudjuk végezni az (56) F funkcionál variálását $\varphi_i^*(\mathbf{r})$ szerint: $0 = \delta F[\Psi] / \delta \varphi_i^*(\mathbf{r})$, amelyből kapjuk a *Hartree-egyenleteket*:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_{\mathbf{r}} - k \frac{Ze^2}{r} + V_i(\mathbf{r}) \right) \varphi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \varphi_i(\mathbf{r}), \quad i = 1, \dots, N, \quad (57a)$$

vagy

$$(H_0(\mathbf{r}) + V_i(\mathbf{r})) \varphi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \varphi_i(\mathbf{r}), \quad i = 1, \dots, N, \quad (57a)$$

ahol bevezettük a

$$V_i(\mathbf{r}) = \sum_{j \neq i} \int d\mathbf{r}' k \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} |\varphi_j(\mathbf{r}')|^2, \quad i = 1, \dots, N \quad (57b)$$

jelölést az elektronfelhőből adódó Coulomb kölcsönhatási tagra.

A Hartree egyenleteket iteratív eljárással oldották meg: kiindultak egy nulladik közelítésből, amelyben az elektronok egymásra gyakorolt kölcsönhatását elhanyagolták: $V_i(\mathbf{r}) = V_i^{(0)}(\mathbf{r}) = 0$. A (57a) megoldása révén így nyert $\{\varphi_i^{(0)}\}$ egyrészeske állapotokból (57b) segítségével kiszámolták a potenciál egy jobb közelítését:

$$V_i^{(1)}(\mathbf{r}) = \sum_{j \neq i} \int d\mathbf{r}' k \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} |\varphi_j^{(0)}(\mathbf{r}')|^2,$$

amellyel újra megoldva (57a)-t $\{\varphi_i^{(1)}\}$ -ket kapták, amelyből (57b) révén $V_i^{(2)}$ -ket, majd ebből $\{\varphi_i^{(2)}\}$ -ket, és így tovább, mindaddig, amíg megfelelő konvergenciát nem értek el az egymást követő megoldásokban, pl. $\|\varphi_j^{(n-1)} - \varphi_j^{(n)}\|^2 \leq \epsilon$ ($j = 1, \dots, N$), ahol ϵ egy előre megadott kis szám, n pedig a végrehajtott iterációk száma.

A Hartree-egyenletekben előforduló ε_i Lagrange-paraméterek összefüggésbe hozhatók az energia operátor várható értékével, ugyanis (57a)-t balról $\varphi_i^*(\mathbf{r})$ -rel beszorozva és $d\mathbf{r}$ szerint integrálva, kapjuk:

$$\varepsilon_i = \langle \varphi_i(\mathbf{r}) | H_0(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}) \rangle_{\mathbf{r}} + \sum_{j \neq i} \left\langle \varphi_i(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}') \left| k \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi_i(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}') \right\rangle_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'},$$

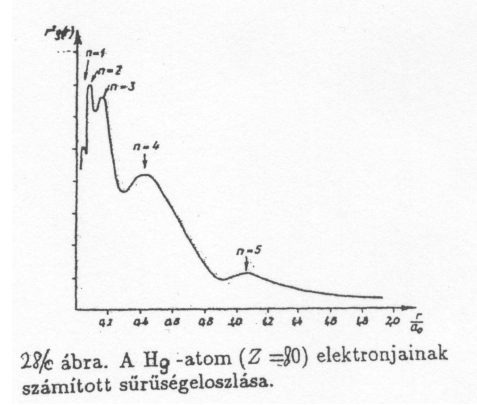
amelyet felhasználva, az energia várható értékére az

$$\begin{aligned} E_H \equiv \langle \Psi | H \Psi \rangle &= \sum_{i=1}^N \langle \varphi_i(\mathbf{r}) | H_0(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}) \rangle_{\mathbf{r}} + \sum_{i>j} \left\langle \varphi_i(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}') \left| k \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi_i(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}') \right\rangle_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}, \\ &= \sum_{i=1}^N \varepsilon_i - \sum_{i<j} \left\langle \varphi_i(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}') \left| k \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi_i(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}') \right\rangle_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}, \end{aligned}$$

kifejezést nyerjük, mivel $\sum_{i>j} = \sum_{j \neq i} - \sum_{i<j}$.

Az antiszimmetrizációt figyelembevevő Fock-féle kiegészítéssel, valamint az így nyert *Hartree – Fock egyenletek* atomokra és molekulákra történő alkalmazásaival a következő félévben, az "Atom- és molekulafizika" c. tárgy keretében fogunk foglalkozni.

Az (57a) Hartree-egyenletek önkonzisztens (iterációs) technikával történő megoldásai révén meglehetősen pontos információt kapunk az atomok és molekulák belsejéről (elektronszerkezetéről, geometriájáról). A 28/c. ábra a Hg-atom ($Z = N = 80$) $r^2 \rho(r) = r^2 \sum_i^N |\varphi_i(r)|^2$ radiális sűrűségeloszlását mutatja be. Az ábrán jól elkülönülnek a különböző egyrészecske állapotoknak és így az n főkvantumszámnak megfelelő *héjak* járulékai.



6. SZÓRÁSI ÁLLAPOTOK

Ebben a fejezetben a stacionárius Schrödinger egyenlet *pozitív energiákhoz* tartozó megoldásait, az ún. *szórási állapotokat* vizsgáljuk. (Az energiaskála nulla pontját általában a nemkölsönható rendszer alapállapot energiáértékével definiáljuk.) Jóllehet egy szórásfolyamat tipikusan időben lejátszódó jelenség, mégis, amennyiben a szóródó objektumok alkotórészei közti kölcsönhatás független az időtől (azaz a potenciál konzervatív), a szórást jellemző és kísérletileg is megfigyelhető mennyiségek az időtől független Schrödinger egyenletből származtathatók.

Kizárólag olyan ütközésekkel foglalkozunk, amelyekben *két* szóródó partner, vagy egy részecske és egy szórócentrum vesz részt, mivel a három-, ill. többtest ütközések kvantummechanikai elmélete meghaladja célkitűzéseinket. (A háromtest ütközések leírására az 1965-ben felállított Fagyjev-, ill. az ezzel ekvivalens, és 1969-ben felírt Alt-Grassberger-Sandhas egyenletek szolgálnak; négyrészecske szórás a Yakubovski-egyenlet segítségével tárgyalható, míg az általános n -test szórási egyenletek elmélete jelenleg is kutatás tárgyát képezi; erre alkalmas egyenletet elsőként Bencze és Redish írt fel 1974-ben.)

Míg az előző fejezetben vizsgált, negatív energiákhoz tartozó megoldások – azaz a kötött állapotok – a tér egy bizonyos tartományára lokalizálódnak [ti. a kötött részecske(rendszer) által elfoglalt térrészre], addig a szórási állapotok nyilvánvalóan nem lokalizálhatók a térben. A szórási állapotok tehát másféle *határfeltételek*nek tesznek eleget, mint a kötött állapotok. A szórási határfeltételek rendkívül változatos formában való megfogalmazásának lehetősége teszi a kvantummechanikai szóráselméletet olyan gazdaggá és szerteágazóvá. Közös gyökere azonban mindegyik megfogalmazásnak az, hogy a szórócentrumtól (a kölcsönhatási tartománytól) távol a hullámfüggvény a

$$(H_0 - E)S(r, E) = 0, \quad (H_0 - E)C(r, E) = 0$$

ún. "szabad" Schrödinger egyenletet kielégítő két független megoldás, a reguláris (S) és az irreguláris (C) megoldás lineárkombinációjaként írható fel:

$$\psi(r \rightarrow \infty, E) = a(E)S(r, E) + b(E)C(r, E),$$

ahol az $E > 0$ energiától függő a és b együtthatók közvetlen kapcsolatban állnak a mérhető hatáskeresztmetszettel. (A szükséges másik határfeltétel általában az origóbeli regularitás: $\psi =$ véges, ha $r \rightarrow 0$.)

6.1. EGYDIMENZIÓS SZABAD MOZGÁS

Egyik célja minden szórás kísérletnek az, hogy általuk a mikrorészecskék kölcsönhatásáról, a köztük lévő V potenciálról információt szerezzünk. A szórás folyamat a bombázó lövedék (projektil) és a céltárgy (target) részecskéi között zajlik. Az ütközés lehet *rugalmas*, amikor nincs energiacsere, a kijövő részecske (ejektil) kinetikus energiája megegyezik a projektil kinetikus energiájával, lehet *rugalmatlan*, amikor a projektil kinetikus energiája részben az ütköző partner(ek) gerjesztésére fordítódik, s végül, a szórás folyamat eredményeként megváltozhat az ütköző partnerek anyagi összetétele, amikor is *reakció*ról beszélünk.

Az ütközési folyamat során a lövedék kezdetben makroszkópikus távolságra van a céltárgytól, s az ütközés lezajlása után, a detektáláskor, szintén makroszkópikus távolságra távolodik az ütközés színhelyétől.

Ezért első lépésként azt tisztázzuk, hogy a kvantummechanika szerint hogyan képzelhetjük el egy lövedék mozgását távol a kölcsönhatási tartománytól, ahol $V = 0$.

Az

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x, t)$$

Schrödinger egyenlet egy m tömegű szabad részecske mozgását írja le térben és időben.

Ennek az egyenletnek van *síkhullám* megoldása:

$$\Psi_p(x, t) = A(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)},$$

amely egy élesen meghatározott p impulzussal és $E = p^2/2m$ energiával rendelkező részecske pozitív x -irányba haladó mozgásának felel meg. Azonban ez a részecske a térben *mindenütt* egyforma valószínűséggel található meg, hiszen $|\Psi_p|^2 = |A(p)|^2 = \text{állandó}$ (x -ben és t -ben). Ez természetes is, mivel egy síkhullám kiterjedt objektum, nem lokalizálható csupán a tér egy tartományára. Ebből következően a fenti megoldás nem is normálható.

Könnyen belátjuk, hogy

$$(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \infty, \quad \text{és} \quad (\Delta p)^2 = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = 0,$$

összhangban az előbb elmondottakkal.

Egy ilyen idealizált részecske(hullám) sebességét *fázis sebesség*nek hívjuk, amit könnyen kiszámíthatunk a $\lambda = h/p$ hullámhossz és a $T = h/E$ periódusidő hányadosaként:

$$v_f = \frac{\lambda}{T} = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m}.$$

Térben *lokalizált* megoldást kapunk, ha nem egyetlen p impulzus-komponensből állítjuk elő a megoldást, hanem sok különböző impulzusú síkhullám megoldást összegzünk (integrálunk) össze ($E = p^2/2m$):

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} dp.$$

Ez a hullámfüggvény nyilván kielégíti a szabad Schrödinger egyenletet. Kimutatjuk, hogy ez a *hullámcsomagnak* nevezett megoldás térben lokalizált szabad részecskét ír le.

Legyen az egyes síkhullám komponensek amplitúdója pl.

$$A(p) = Q e^{-(p-p_0)^2 d^2 / \hbar^2}.$$

Ezt behelyettesítve és felhasználva az

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2+2bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/a}$$

Gauss-integrál értékét, kapjuk:

$$\Psi(x, t) = \frac{Q}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/a-c},$$

ahol

$$a = \frac{d^2}{\hbar^2} + i \frac{t}{2m\hbar}, \quad b = \frac{d^2}{\hbar^2} p_0 + i \frac{x}{2\hbar}, \quad c = \frac{d^2}{\hbar^2} p_0^2.$$

A Q normalizációs tényezőt $Q = (8\pi d^2)^{1/4}$ -nek választva, kapjuk a következő *normált* hullámcsomag megoldást a tartózkodási valószínűségekre:

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{d\sqrt{2\pi(1+\Delta^2)}} e^{-(x-vt)^2/2d^2(1+\Delta^2)},$$

ahol bevezettük a hullámcsomag $v = v_{cs}$ csoportsebességét és Δ szélességét jellemző mennyiségeket a

$$v = v_{cs} \equiv \left. \frac{\partial E}{\partial p} \right|_{p=p_0} = \left. \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_{p=p_0} = \frac{p_0}{m}, \quad \text{és} \quad \Delta = \frac{t\hbar}{2md^2}$$

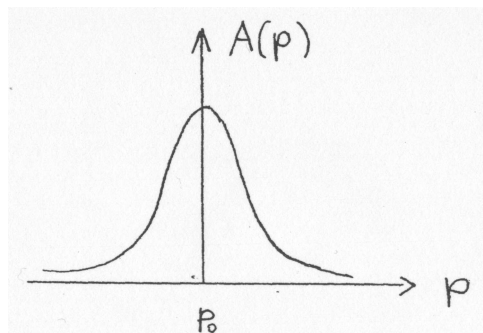
definíciókkal.

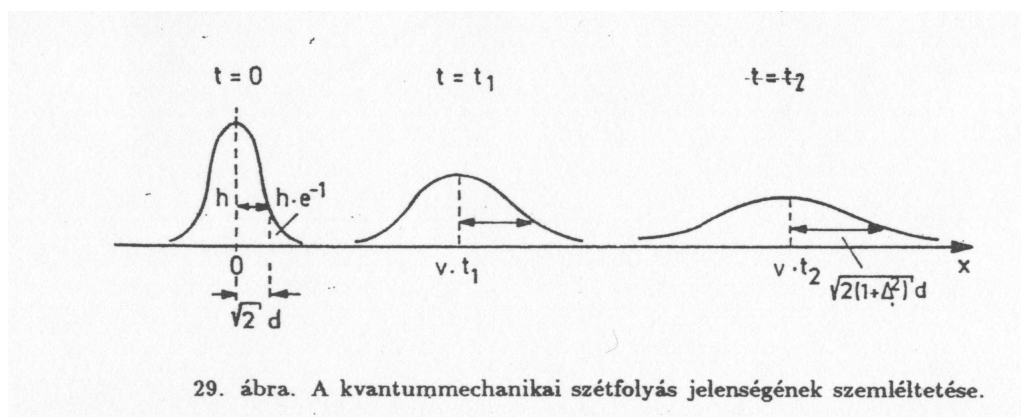
Látjuk, hogy az amplitúdókra Gauss eloszlást véve az impulzus-térben, a hullámcsomag maga is Gauss eloszlású lesz az x -térben. Maximuma az $x_0 = vt$ pontban lesz.

Így a hullámcsomag megoldás már felhasználható a szórás kísérletekben alkalmazott lövedék részecskék kvantummechanikai jellemzésére. Mégis, az egyszerűség kedvéért, a szóráselméleti tárgyalásokban általában nem az integrális hullámcsomag megoldás szerepel kiindulásként (kezdeti, kölcsönhatásmentes állapotként), hanem annak csak egyik komponense, a síkhullám megoldás. Mi is ezt az egyszerűsítő utat követjük.

Megjegyzendő még, hogy a hullámcsomag sebessége, a csoportsebesség, kétszerese a p_0 impulzusú síkhullám fázissebességének. Ennek fizikai oka az, hogy a hullámcsomag különböző impulzusú síkhullámok szuperpozíciója s ezek diszperziója, $d\omega/dk = dE/dp$ adja meg az átlagos sebességet. Ebből rögtön következik, hogy a hullámcsomag alakja időben nem állandó, vannak benne "gyorsabb" és "lassabb" komponensek: a hullámcsomag szétfolyik. Ezt a jelenséget, amely a klasszikus fizikában ismeretlen és a hullámmechanikai leírás sajátossága, kvantummechanikai szétfolyás jelenségének hívjuk.

A fenti megoldás jól szemlélteti a szétfolyás jelenségét: a részecske megtalálási valószínűségét jellemző $|\Psi|^2$ haranggörbe függvény maximuma vt sebességgel halad a pozitív x -irányba, míg a félérték szélessége időben nő, maximuma pedig csökken (ld. 29. ábra).





Számítsuk most ki az x operátor várható értékét!

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 x dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 (x - vt) dx + \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 vt dx = vt,$$

mivel a második egyenlőség után álló első tag zérus, lévén $(x - vt)$ páratlan függvénye.

Hasonló módon adódik:

$$(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = d^2(1 + \Delta^2), \quad \Delta = \frac{\hbar}{2md^2}t.$$

Példák:

1) Makroszkópikus méretek tartományában a szétfolyás jelensége nem számottevő. Legyen ui. a lövedék hullámcsomagunk tömege $m = 10^{23} \times 10^{-24} \text{g} = 10^{-1} \text{g}$. Ehhez $\Delta = 10^{-26}t/d^2$ félérték szélesség tartozik. A helybizonytalanság: $\Delta x = d\sqrt{1 + \Delta^2}$. Legyen lokalizálva a részecskénk kezdetben, $t = 0$ s esetén, $\Delta x = d = 10^{-8} \text{cm}$ tartományra. $t = 10^{10} \text{s}$ múlva nő a félérték szélesség $\Delta = 1$ -re, s így az elmosódottság $\sqrt{2}$ -szeresére: $\Delta x = \sqrt{2} \times 10^{-8}$, ami nem számottevő. Ráadásul ilyen sokáig nem szokott tartani egy kísérlet sem.

2) Mikroszkópikus részecskével, pl. α -részecskével elvégzendő kísérlet esetén $\Delta = (10^{-27}/2 \times 4 \times 1,6 \times 10^{-24})t/d^2 \approx 10^{-4}t/d^2$. Az α -részecske kiterjedése $t = 0$ s esetén: $\Delta x = d = 10^{-11} \text{cm}$. Ezért már $t = 10^{-18} \text{s}$ alatt válik Δ egységgé, s így $\Delta x = \sqrt{2}d$ -szeresé. A kvantummechanikai tárgyalás itt már elkerülhetetlen. Hasonló nagyságrendek adódnak, ha egy elektron lokalizáltságát vizsgáljuk az atomon belül. Egy elektron-hullámcsomag mérhetetlenül rövid időn belül delokalizálódik az atom teljes tartományára, s így a klasszikus tárgyalás nem lehetséges.

6.2. EGYDIMENZIÓS SZÓRÁS

Ez az eset akkor valósul meg, amikor a szórási (=pozitív energiájú) állapotban levő részecske számára a mozgás csak egy dimenzióban lehetséges (pl. elektron vékony vezetőben). Első példaként azt az esetet vizsgáljuk, amikor a részecske mozgása során *egyetlen* potenciálon szóródik, amin részben áthalad,

részben visszaverődik. Ilyen eset valósul meg közelítőleg egy s -állapotú ($\ell = 0$) α -részecskének az atommagból való kiszabadulásakor (α -bomlás). Más esetben, pl. fémek v. egyéb szilárd anyagok esetén az anyagban levő, nem helyhez kötött (delokalizált) elektronoknak *nagyszámú* hasonló, *periódikusan* elhelyezkedő szórócentrumot kell leküzdeniük mozgásuk során, s ezzel magyarázható többek között a szilárd anyagok különféle tulajdonságai.

Példáinkban a potenciálokra speciális (derékszögű) alakot tételezünk fel, mivel erre az esetre a Schrödinger egyenlet megoldásai analitikus alakban megadhatók.

6.2.1. SZÓRÓDÁS EGYDIMENZIÓS POTENCIÁLGÁTON

Legyen a derékszögű potenciál magassága V_0 , szélessége a (30. ábra):

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & -a \leq x \leq 0 \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases} \quad (58a)$$

Klasszikus esetben egy m tömegű, E kinetikus energiájú részecske mindenképpen visszapattan a gátról, ha $E < V_0$, máskülönben áthalad felette.

A kvantummechanika (s így a természet is) megengedi azonban, hogy véges valószínűsége legyen egy $E < V_0$ áthaladásnak, ill. egy $E > V_0$ visszaverődésnek. Ezt a következőképpen láthatjuk be.

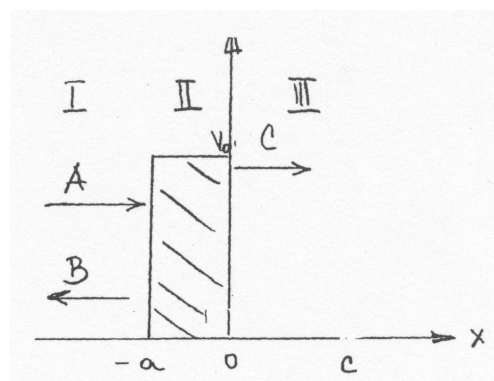


Figure 1: 30. ábra. Potenciálgát.

A szórást (visszaverődést és áthaladást) a Schrödinger egyenlet írja le:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (58b)$$

A potenciálmentes térrészekben a pozitív energiájú részecske $p = \hbar k = \sqrt{2mE}$ impulzus sajátállapotban van s így az aszimptotikus megoldások a következők:

$$\begin{aligned} \psi_I &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x \leq -a \\ \psi_{III} &= Ce^{ikx} & x > 0. \end{aligned} \quad (58c)$$

Az 1. fejezet 1.3.b/ pontja alapján tudjuk, hogy a ψ_I hullámfüggvény A amplitúdójú része (a 30. ábrán nyíllal jelölt) balról jobbra haladó (beeső) részecske-hullámnak felel meg, a B amplitúdójú része pedig a visszavert részecske-hullámnak. Hasonlóképpen, ψ_{III} a potenciálgáton áthaladt részecske-hullámnak felel meg. Az A, B, C amplitúdók további fizikai jelentésének megállapítása céljából képezzük az áramsűrűséget az I-es és a III-as térrészben. Felhasználva a (15b) képletet:

$$J_x = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla_x \Psi^* - \Psi^* \nabla_x \Psi),$$

az áramsűrűségekre a

$$J_I(x) = v(|A|^2 - |B|^2) \equiv J_{be} - J_{vissza}, \quad x \leq -a,$$

$$J_{\text{III}}(x) = v|C|^2 \equiv J_{\text{át}}, \quad x > 0$$

képleteket nyerjük, ahol $v = \hbar k/m$ a részecske sebességét jelenti. Mivel a fenti áramsűrűségek x -től függetlenek, ezeket az egyes térrészekben levő nettó részecskefluxusként interpretálhatjuk, ami jól összeegyeztethető avval a fenti megállapítással, hogy A a beeső, B a visszvert, C pedig az áthaladt részecske amplitúdója. Így a visszaverődési (reflexiós) együtthatót az

$$R = \frac{J_{\text{vissza}}}{J_{\text{be}}} = \frac{|B|^2}{|A|^2},$$

az áthaladási (transzmissziós) tényezőt a

$$T = \frac{J_{\text{át}}}{J_{\text{be}}} = \frac{|C|^2}{|A|^2}$$

képlet definiálja. Megmaradás miatt $J_{\text{be}} = J_{\text{át}} + J_{\text{vissza}}$, amiből $R + T = 1$ következik.

R és T meghatározása érdekében szükségünk van a potenciálgáton belüli megoldásra, ψ_{II} -re, amely kapcsolatot teremt ψ_{I} és ψ_{III} között. Minthogy a középső tartományban ($-a \leq x \leq 0$) a potenciál konstans, a részecske erőmentes térben mozog, következésképpen szintén impulzussajátállapotban van. A megoldás ezért az előzőekhez hasonlóan (formálisan) szabad síkhullám:

$$\psi_{\text{II}} = F e^{i\alpha x} + G e^{-i\alpha x}, \quad -a \leq x \leq 0,$$

ahol most az $\alpha = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ impulzus attól függően valós, vagy imaginárius, hogy $E - V_0$ értéke pozitív, vagy negatív.

Kapcsolatot a különböző térrészbeli megoldások és amplitúdóik között azon regularitási követelmény szolgáltat, miszerint a megoldásoknak és első deriváltjaiknak a potenciál *véges* szakadási helyein meg kell egyezniük (ld. 2.2/b fejezet):

$$\psi_{\text{I}}(-a) = \psi_{\text{II}}(-a), \quad \text{ill.} \quad \psi'_{\text{I}}(-a) = \psi'_{\text{II}}(-a)$$

és

$$\psi_{\text{II}}(0) = \psi_{\text{III}}(0), \quad \text{ill.} \quad \psi'_{\text{II}}(0) = \psi'_{\text{III}}(0),$$

azaz

$$A e^{-ika} + B e^{ika} = F e^{-i\alpha a} + G e^{i\alpha a}, \quad \text{ill.} \quad k(A e^{-ika} - B e^{ika}) = \alpha(F e^{-i\alpha a} - G e^{i\alpha a}),$$

és

$$F + G = C, \quad \text{ill.} \quad \alpha(F - G) = kC.$$

F és G eliminálása után egyszerű számolással a következő két egyenletet nyerjük a számunkra érdekes C/A , ill. B/A amplitúdó arányokra:

$$\frac{C}{A} = e^{-ia(k \mp \alpha)} + \frac{B}{A} \frac{\alpha \mp k}{\alpha \pm k} e^{ia(k \pm \alpha)}, \quad (59)$$

amelyekből

$$\frac{B}{A} = \frac{(k^2 - \alpha^2)(1 - e^{i2\alpha a})}{(k + \alpha)^2 - (k - \alpha)^2 e^{i2\alpha a}} e^{-i2ak},$$

illetve

$$\frac{C}{A} = \frac{4k\alpha e^{i(\alpha-k)a}}{(k + \alpha)^2 - (k - \alpha)^2 e^{i2\alpha a}}$$

adódik. Így a szórásra jellemző R és T mennyiségek:

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left[1 + \frac{4k^2\alpha^2}{(k^2 - \alpha^2)^2 \sin^2 \alpha a} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2 \alpha a} \right]^{-1} \quad (60a)$$

és

$$T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \left[1 + \frac{(k^2 - \alpha^2)^2 \sin^2 \alpha a}{4k^2\alpha^2} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{V_0^2 \sin^2 \alpha a}{4E(E - V_0)} \right]^{-1}. \quad (60b)$$

Könnyen meggyőződhetünk arról, hogy $R + T = 1$, ami a részecske(áramsűrűség) megmaradást fejezi ki.

$E \rightarrow V_0$, azaz $\alpha \rightarrow 0$ esetén a $\sin \alpha a \sim \alpha a$ sorfejtéssel az áthaladási valószínűség a potenciál átlátszóságára jellemző

$$T(E \rightarrow V_0) = \left[1 + \frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2} \right]^{-1}$$

képlettel adható meg, ami egy véges, 0 és 1

közötti értéket szolgáltat. (Látjuk, hogy fizikai várakozásunkkal összhangban egy részecske nem tud áthalolni a falon, ha $m \rightarrow \infty$, $V_0 \rightarrow \infty$, ill. $a \rightarrow \infty$.)

Az $E > V_0$ tartományban, növekvő E esetén T oszcillál az egység és egy alulról ehhez közelítő burkoló görbe között (31. ábra). Tökéletes áthaladást (zérus visszaverődést) csak $\alpha a = \pi, 2\pi, \dots$ esetén kapunk. Minthogy ez a megállapítás V_0 előjelétől független, *vonzó potenciálvölgy esetén is van visszaverődés*.

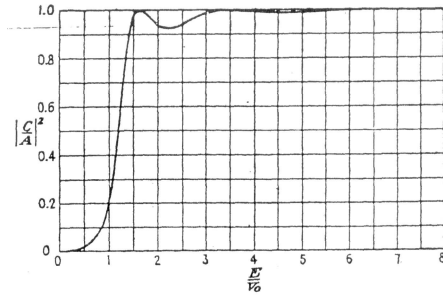
A transzmissziós együttható $0 < E < V_0$ tartománybeli viselkedésének megállapítása céljából alkalmazzuk az $\alpha = i\beta$ helyettesítést, ahol $\beta = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$. Ekkor

$$T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \left[1 + \frac{V_0^2 \sinh^2 \beta a}{4E(V_0 - E)} \right]^{-1} \quad (E < V_0).$$

Ez a képlet monoton csökkenést jósol az áthaladás valószínűségére $T(E \rightarrow V_0)$ fenti értékétől zérusig, amit $E = 0$ esetén ér el (ld. 31. ábra, ahol a transzmissziós viszonyokat tüntettük fel egy meglehetősen "homályos" potenciálra, amelynél $mV_0 a^2/\hbar^2 = 8$).

Amennyiben $\beta a \gg 1$, azaz a barrier széles és/vagy magas E -hez viszonyítva, a fenti képlet (a $\sinh x = [\exp(x) - \exp(-x)]/2$ definíció miatt) a következő egyszerűbb és gyakorta használt formában írható:

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\beta a} \quad (E \ll V_0 \text{ és/vagy } \beta a \gg 1). \quad (61)$$



31. ábra. Áthaladási együttható a redukált energia függvényében egy "homályos" ($mV_0 a^2/\hbar^2 = 8$) potenciálját esetén.

Az, hogy $E < V_0$ esetén is van véges valószínűsége a részecske áthaladásának a potenciálgáton, tisztán kvantummechanikai effektus és a részecskék hullámtermészetéből következik. Ennek az *alagúteffektus* néven ismeretes jelenségnek fontos szerep jut a szilárdtestek, molekulák és atommagok tulajdonságainak megértésében (hidegemisszió, spontán ionizáció, molekuláris reakciók, α -bomlás, maghasadás, stb.)

6.2.2. POTENCIÁLCSAPDA, VIRTUÁLIS ENERGIASZINTEK

Amennyiben a C amplitúdójú részecskeáram egy (végtelen magasságú) potenciálfallal találja szembe magát az $x = c$ helyen (ld 32. ábra), akkor erről a falról is történik visszaverődés, amely hullám amplitúdóját D -vel fogjuk jelölni.

A (58c) egyenlet ezért így módosul:

$$\psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad -a \leq 0$$

$$\psi_{III}(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}, \quad c \geq x > 0 \quad (62a)$$

a folytonossági feltételből kapott (59) alatti két egyenlet pedig a következő lesz [kihasználjuk, hogy $\psi_{III}(c) \equiv 0$]:

$$\frac{B}{A} = \frac{C}{A} e^{-ia(k \pm \alpha)} \left[\frac{\alpha \pm k}{\alpha \mp k} - e^{i2kc} \right] - e^{-i2ak} \frac{\alpha \pm k}{\alpha \mp k}, \quad (62b)$$

s ebből az áthatolásra jellemző amplitúdó a következőnek adódik:

$$\frac{C}{A} = \frac{2k\alpha e^{-iak}}{i \sin a\alpha [(\alpha^2 - k^2)e^{i2kc} - (\alpha^2 + k^2)] + 2k\alpha \cos a\alpha}. \quad (62c)$$

Amennyiben $E < V_0$, érdemes áttérni a korábbi $\alpha = i\beta = i\sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ jelölésre, és felhasználva az $i \sin ix = -\sinh x = (e^{-x} - e^x)/2$, $\cos ix = \cosh x = (e^{-x} + e^x)/2$ azonosságokat, $a\beta \gg 1$ esetén a

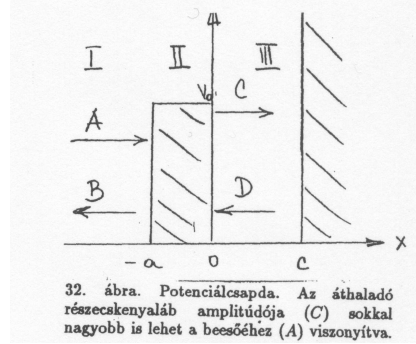
$$\frac{C}{A} = \frac{i4k\beta e^{-iak} e^{-a\beta}}{(\beta^2 + k^2)e^{i2kc} + (k^2 - \beta^2) + 2ik\beta}$$

összefüggés adódik. Az áthaladó hullám amplitúdója tehát általában kicsi a beesőéhez viszonyítva. Azonban, ha a beeső hullám energiája történetesen olyan, hogy a fenti kifejezés nevezője kis értéket vesz fel, akkor az áthaladó hullám amplitúdója, ebben a különleges esetben, nagyobb is lehet a beesőénél. Ilyen speciális k hullámszám értékeknél a részecske csapdába kerül: nagyobb valószínűséggel tartózkodik a potenciálgáton belül, mint kívül. Az olyan speciális energiaszinteket, amelyeknél ez a jelenség bekövetkezik, *virtuális energiaszintek*nek nevezzük. A 32. ábrán bemutatott potenciálgátnak megfelelő virtuális energiaszintek a

$$(\beta^2 + k^2)e^{i2kc} + (k^2 - \beta^2) + 2ik\beta = 0 + i0$$

feltételből a következőknek adódnak:

$$(k^2 - \beta^2) + (k^2 + \beta^2) \cos 2kc = 0, \quad (63a)$$



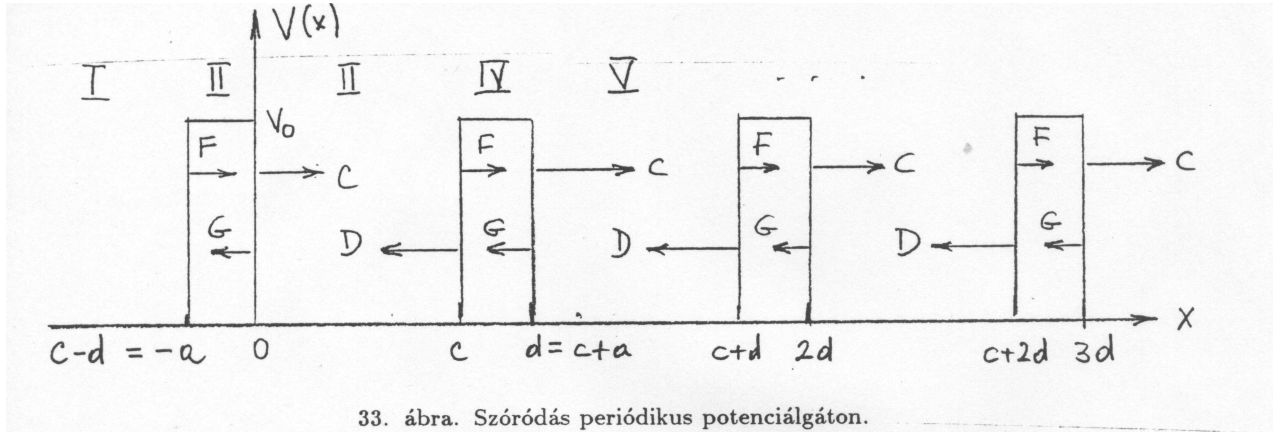
$$2k\beta + (k^2 + \beta^2) \sin 2kc = 0. \quad (63b)$$

Egy megoldását ennek az egyenletrendszernek azonnal megadhatjuk, ha $2kc$ -t $(4n-1)\pi/2$ -nek választjuk ($n = 1, 2, \dots$), mivel ekkor $\cos 2kc = 0$, $\sin 2kc = -1$ és így a további $k = \beta$ feltétellel kielégíthető a fenti egyenlet. Ez utóbbi feltétel az energiára az $E = V_0/2$ megszorítást jelenti. Végeredményben tehát, ha

$$k = \sqrt{mV_0} = \frac{\pi}{c}(n - \frac{1}{4}), \quad n = 1, 2, \dots$$

teljesül, a részecske csapdába kerül. A (63) alatti egyenleteknek több megoldása is lehet fix V_0 és c mellett. Érdekes, hogy a potenciálgát a szélességétől látszólag független az itt megadott virtuális energiaszint értéke. Viszont tudjuk azt, hogy eredményünk csak az $a\beta = ak \gg 1$ feltétel teljesülése esetén érvényes.

6.2.3. SZÓRÓDÁS PERIÓDIKUS POTENCIÁLGÁTON. (FÉMEK, FÉLVEZETŐK, SZIGETELŐK MODELLEZÉSE.)



33. ábra. Szóródás periódikus potenciálgáton.

Előző megfontolásainkat kiterjeszthetjük arra az esetre is, amikor nem egyetlen potenciálgát van az x -térben, hanem végtelen sok, egymástól $d = c + a$ periódus távolságra elhelyezkedve (ld. 33. ábra).

Az ilyen *periódikus* potenciált a

$$V(x + d) = V(x) \quad (64)$$

eltolási szimmetria jellemzi, amiből az következik, hogy a Schrödinger egyenlet x helyen vett megoldása, $\varphi(x)$, legfeljebb egy $\gamma = \text{állandó}$ faktor erejéig különbözhet az $x + d$ helyen vett megoldástól:

$$\varphi(x + d) = \gamma \varphi(x).$$

Az n -edik periódusra

$$\varphi(x + nd) = \gamma^n \varphi(x)$$

adódik, amiből a hullámfüggvényre vonatkozó *korlátossági feltétel* miatt

$$|\gamma| = 1, \quad \gamma = e^{iKd}$$

következik. Végeredményben tehát, periódikus potenciálokhoz a

$$\varphi(x + nd) = e^{iKnd}\varphi(x), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (65)$$

ún. modulált síkhullám megoldások tartoznak (K valós!).

A lehetséges energiaértékeket – ugyanúgy mint mindig – a határfeltételek (itt: folytonossági kritériumok) kielégítése révén kapjuk meg. A 33. ábra II. és III. térrészében a megoldások a

$$\varphi_{II} = Fe^{\beta x} + Ge^{-\beta x} \quad (66a)$$

$$\varphi_{III} = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \quad (66b)$$

formában írhatók. A két zóna határán a megoldásoknak és deriváltjainak meg kell egyezniük:

$$\varphi_{II}(0) = \varphi_{III}(0)$$

$$\varphi'_{II}(0) = \varphi'_{III}(0)$$

azaz

$$F + G = C + D \quad (67a)$$

$$\beta(F - G) = ik(C - D) \quad (67b)$$

A következő periódus, a IV+V zóna megoldásai – (65) miatt – kifejezhetők az előzővel:

$$\varphi_{IV}(x) = e^{iKd}\varphi_{II}(x - d) = e^{iKd} \left[Fe^{\beta(x-d)} + Ge^{-\beta(x-d)} \right] \quad (68a)$$

$$\varphi_V(x) = e^{iKd}\varphi_{III}(x - d) = e^{iKd} \left[Ce^{ik(x-d)} + De^{-ik(x-d)} \right] \quad (68b)$$

A két megoldás illesztése a

$$\varphi_{III}(c) = \varphi_{IV}(c)$$

$$\varphi'_{III}(c) = \varphi'_{IV}(c)$$

egyenleteket szolgáltatja, amelyek a ($c - d = -a$)

$$Ce^{ikc} + De^{-ikc} = e^{iKd} \left[Fe^{\beta(-a)} + Ge^{-\beta(-a)} \right] \quad (69a)$$

$$ik(Ce^{ikc} - De^{-ikc}) = e^{iKd}\beta \left[Fe^{\beta(-a)} - Ge^{-\beta(-a)} \right] \quad (69b)$$

formában írhatók fel. Ez négy (valós) egyenletet szolgáltat a négy (valós) együttható (F, G, C, D) meghatározására. Triviálistól különböző megoldást akkor kapunk, ha az együtthatókból képezett determináns eltűnik, azaz

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \beta & -\beta & -ik & ik \\ e^{iKd-\beta a} & e^{iKd+\beta a} & -e^{ikc} & -e^{-ikc} \\ \beta e^{iKd-\beta a} & -\beta e^{iKd+\beta a} & -ike^{ikc} & ike^{-ikc} \end{vmatrix} = 0, \quad (70)$$

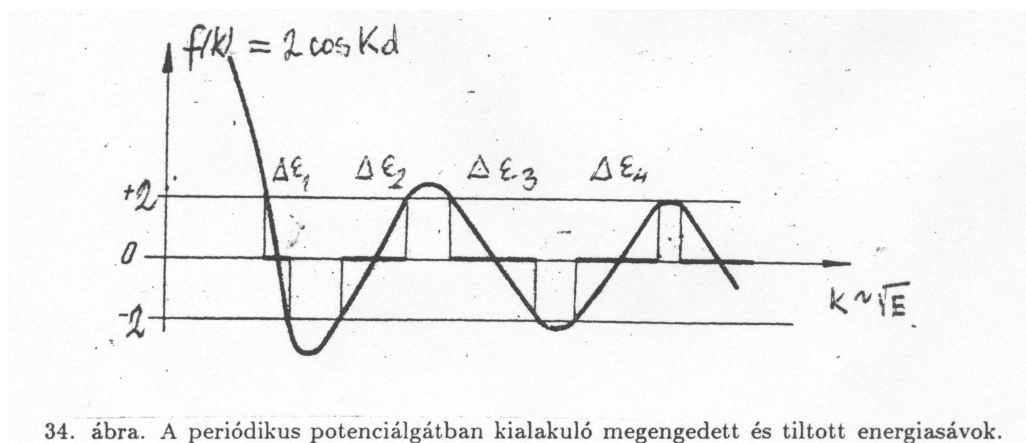
amiből egy kötelező egyenlőség fennállását nyerjük a k hullámszám különböző értékei mellett a K "effektív" hullámszáma:

$$2 \cos Kd = e^{-\beta a} \left[\cos kc + \frac{k^2 - \beta^2}{2\beta k} \sin kc \right] + e^{\beta a} \left[\cos kc - \frac{k^2 - \beta^2}{2\beta k} \sin kc \right] \equiv f(k). \quad (71)$$

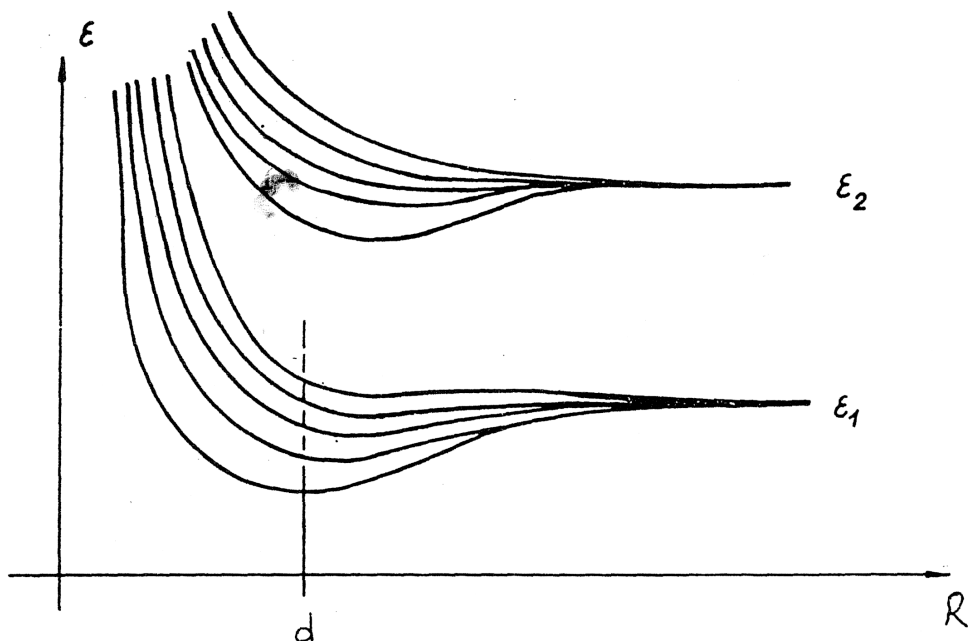
Mármost nyilvánvaló, hogy $f(k)$ csak -2 és $+2$ közötti értékeket vehet fel:

$$-2 \leq f(k) = 2 \cos Kd \leq 2,$$

ez a feltétel viszont bármely k érték esetén nem teljesül. Pl., $k = n\pi/c$, ($n = 0, 1, 2, \dots$) esetén biztosan nem elégül ki a fenti egyenlőség. Azt kaptuk tehát, hogy periódikus potenciálok esetén (is) vannak megengedett $E = \hbar^2 k^2 / 2m_e$ energiaértékek, amelyeknek megfelelő k értékek (71)-et kielégítik, és vannak tiltott értékek, amelyek esetén (71) nem teljesül.

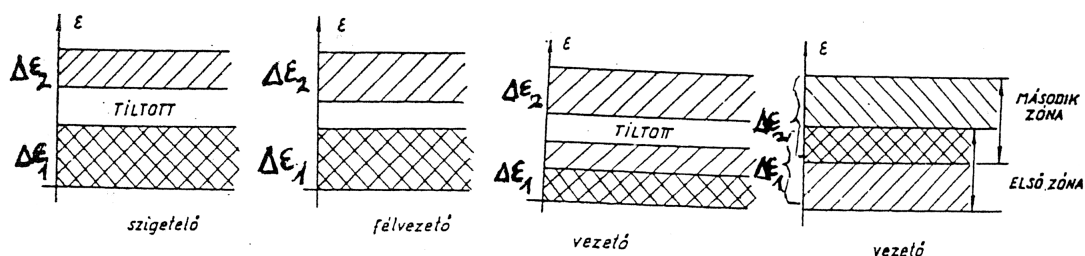


Ez az eredmény rögtön megengedi azt, hogy kvalitatíve értelmezzük a fémek, szigetelők mibenlétét. Képzeljünk el egy igen "híg" fémot, amelyben az egyes atomtörzsek nagyon nagy R távolságra helyezkednek el egymástól. Az atomtörzs potenciáljában kialakulnak az elfajult $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots$ energiaállapotok (vegyértéknívók), amelyeket elfoglalhatnak elektronok (ld. 35. ábra). Közelítve egymáshoz az atomokat, a valenciaszintek felhasadnak a többi atom perturbáló hatására, és egy optimális d rácsállandó esetén, amely mellett az atomtörzsekből és ezeken kívüli elektronokból álló rendszer energiája a legkisebb, kialakulnak a periódikus potenciálokra jellemző tiltott és megengedett ($\Delta\varepsilon_1, \Delta\varepsilon_2$) energiasávok (ld. 35. ábra).



35. ábra. Szilárdtestek aktív elektronjaihoz tartozó energianívók (-sávok) kialakulása.

Mármost, ha a $\Delta\varepsilon_1$ sáv teljesen be van töltve elektronokkal, a $\Delta\varepsilon_2$ -höz tartozó sáv pedig üres, továbbá a két sáv közti távolság ("gap") nagy, akkor az elektronok számára a mozgási lehetőség nyilvánvalóan korlátozott. Az ilyen anyagok rossz elektromos és hővezetők, azaz szigetelők (ld 36. ábra). Amennyiben a két megengedett sáv közti tiltott zóna (gap) kicsi, az alsó betöltött sávból könnyebben gerjeszthetők az elektronok az üresbe, amely által aktív, vezetésre képes elektronokat nyerünk – ezek a félvezetők. Fémek esetén pedig megkülönböztetünk egy-, ill. kétvegyértékű fémeket. Egyvegyértékű fémek esetén az első nívó csak félig van betöltve elektronokkal s ezért már kis elektromos tér hatására kapunk aktív elektronokat. Kétvegyértékű atomokból akkor lesznek jó vezetők (fémek), ha a két sáv átfedi egymást, azaz a két sáv között nincs tiltott zóna és így az elektronok az ε_1 -es sávból könnyen átkerülhetnek a "mozgékony" ε_2 -es sávba (36. ábra).



36. ábra. Szilárdtestekben kialakuló tiltott zónák szemléltetése.

A szilárdtestfizikában kiterjedten használják az ún. "effektív tömeg" fogalmát. Ennek bevezetése azon alapul, hogy a periódicitás miatt fennálló $\exp(iKnd)\varphi(x) = \varphi(x + nd)$ feltétel miatt a K mennyiség

a csillapítatlanul transzmittálódó elektron effektív hullámszámával azonosítható (az impulzus az eltolás operátor generátora). Az effektív hullámszám nem feltétlenül egyenlő a k fizikai hullámszámmal. Formálisan azonban felírhatunk egy összefüggést köztük az $m^*(k)$ effektív tömeg bevezetésével a következő módon:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 K^2(k)}{2m^*(k)}.$$

Mint hogy $K(k) = \arccos(f(k)/2)/d$ értékei $-\infty$ és ∞ közé eshetnek, az effektív tömeg értékei is erősen változhatnak k függvényében.

6.3. HÁROMDIMENZIÓS SZÓRÁS

Világunk három térdimenzióval rendelkezik, így az ütközési folyamatok valójában mindig három dimenzióban játszódnak le. Az ütközéseket legkényelmesebben tömegközépponti koordináta rendszerben írhatjuk le. Mivel kéttest ütközésekkel foglalkozunk, és az 5.3.1. fejezetben láttuk, hogy a kéttest probléma visszavezethető olyan egytest problémára, ahol egy (redukált) tömeggel rendelkező részecske E (tömegközépponti) energiával mozog a (két részecske kölcsönhatását leíró) $V(\mathbf{r})$ potenciálban, ezért a kétrészecske ütközéseket gyakran *potenciálszórásnak* is nevezzük.

A szórás kísérletek tanulmányozásának nyilvánvaló szükségességét az adja meg, hogy ezen az úton szerezhetünk (közvetett) információt a mikrorészecskék (rendszerek) között működő erőkről. Ez az igény különösen nyilvánvaló abban az esetben, amikor a részecskerendszerek (pl. atommagok, atomok, molekulák, klaszterek) alkotórészei közötti elemi kölcsönhatás nem ismeretes (mint pl. a nukleonok között). De hasonló igény támasztható olyan esetben is, amikor a rendszerek alkotórészei közti erők "egzaktul" ismeretesek, mint pl. az atombeli elektronok között, ugyanis az összetett rendszerek közötti effektív kölcsönhatás elméleti meghatározása a kötött állapoti probléma egzakt megoldását igényli, ami a gyakorlatban kivitelezhetetlen feladat. Így tehát szükségképpen közelítésekre (modell feltevésekre, különböző módszerek bevezetésére) vagyunk utalva, és ahhoz, hogy az egyes közelítések jóságát ellenőrizhessük, kísérleti tapasztalatokhoz kell fordulnunk.

Megjegyzendő, hogy gömbszimmetrikus potenciálok esetére ki van dolgozva a kvantummechanikai szórás *inverz* elmélete. Az R. G. Newton-, ill. Gel'fand-Levitan- és Marchenko-egyenletek segítségével a megfigyelt szórási adatokból meghatározhatjuk a potenciált minden modell-előfeltevés nélkül. A kvantummechanikai szórás inverz elméletével felsőbb éves tanulmányainkban foglalkozunk, jelenlegi célunk a szóráselmélet alapfogalmainak megismerése.

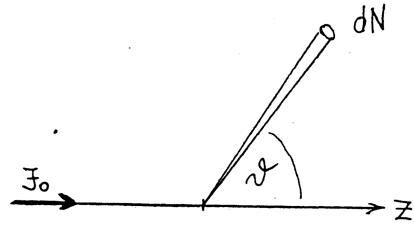
6.3.1. SZÓRÁSI HATÁSKERESZTMETSZET

Egy szórás kísérletben a $V(\mathbf{r})$ kölcsönhatásról szolgáltatott alapvető információ a szóródó részecskék különböző szögtartományba való intenzitás-eloszlásának megfigyeléséből, az ún. *szögeloszlásból* nyerhető ki.

Egy fixált erőcentrumon, vagy egy másik részecskén (ún. céltárgyon, targeton) szóródó részecskék (lövedékek, projektilék) irány szerinti eloszlását (szögeloszlását) a szórási *hatáskeresztmetszet* fogalmának bevezetésével értelmezhetjük. Tegyük fel, hogy a szórócentrumra J_0 áramsűrűségű bombázó részecskenyaláb esik be és a beesési irányhoz képest ϑ és φ polárszögekkel jellemzett $d\Omega = \sin\vartheta d\vartheta d\phi$ kúpszögben *időegység alatt* dN részecskét detektálunk. A $d\Omega$ térszögben szóródó részecskék dN másodpercenkénti száma arányos J_0 -al, és $d\Omega$ -val:

$$dN = \sigma(\vartheta, \phi) J_0 d\Omega, \quad (72a)$$

ahol az arányossági tényezőt a szórás *differenciális hatáskeresztmetszetének* nevezzük. Ebbe a mennyiségbe sűrűsödik bele minden információ a tanulmányozni kívánt kölcsönhatásról, $V(\mathbf{r})$ -ről.



(72a) teljes térre vett integrálja a részecskék teljes számát adja másodpercenként

$$N = J_0 \int \sigma(\vartheta, \phi) d\Omega \equiv J_0 \sigma_{tot}, \quad (72b)$$

ahol bevezettük a *teljes hatáskeresztmetszet* fogalmát,

$$\sigma_{tot} = \int \sigma(\vartheta, \phi) d\Omega = \frac{N}{J_0}, \quad (72c)$$

mint a differenciális hatáskeresztmetszet teljes térre vett integrálját, ami tehát az időegység alatt szóródó részecskék számának és a beeső részecske-nyaláb áramsűrűségének a hányadosa. A differenciális hatáskeresztmetszet szokásos jelölése:

$$\sigma(\vartheta, \phi) = \frac{d\sigma(\vartheta, \phi)}{d\Omega} = \frac{dN}{J_0 d\Omega},$$

szokásos egységei: $a_0^2 = 2.80 \times 10^{-17} \text{cm}^2$ (atomfizikában), ill. $1 \text{barn} = 10^2 \text{fm}^2 = 10^{-24} \text{cm}^2$ (magfizikában).

Megjegyzendő, hogy magfizikában fontos szerep jut a hatáskeresztmetszet labor rendszerből tömegközépponti rendszerbe való átszámolásnak. Elektron-atom ütközés esetén a két rendszer gyakorlatilag megegyezik a tömegviszonyok miatt.

6.3.2. SZÓRÁSAMPLITÚDÓ

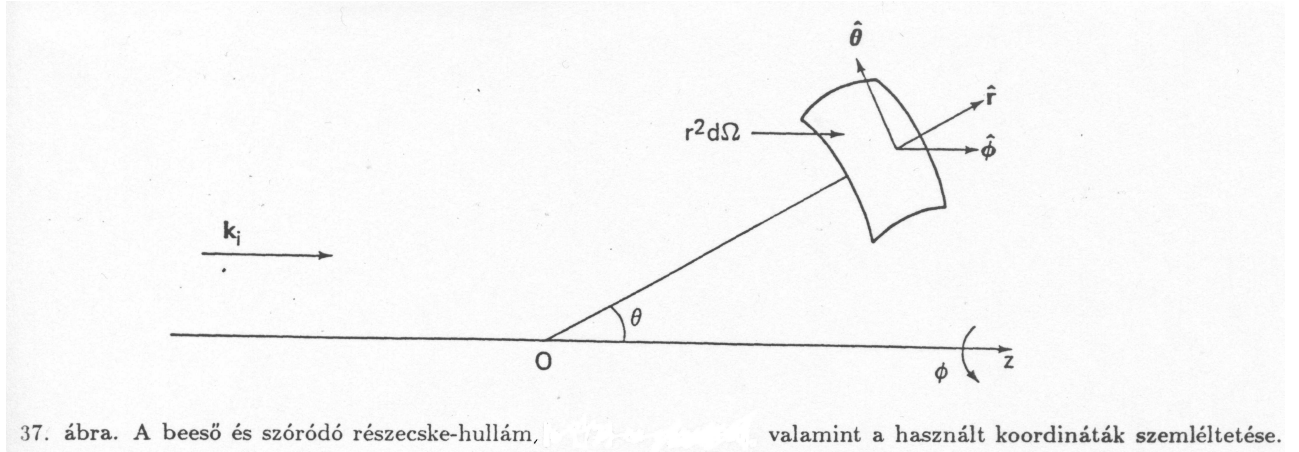
A (14) stacionárius Schrödinger egyenletet *rövidhatótávolságú* ($\lim_{r \rightarrow \infty} V = r^{-1-\epsilon}$) potenciál esetén kielégíti a következő határfeltétel:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)} = A \left(e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}} + f(\vartheta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right) \equiv \Phi_{be}(\mathbf{r}) + \psi_{sz}^{(+)}(\mathbf{r}, k), \quad (73)$$

ahol $A \neq A(\mathbf{r})$ egy – csak energiától függő – normálási állandó, $f(\vartheta, \phi)$ pedig az ún. *szórásamplitúdó*. Könnyen belátható, hogy a (73) alatti határfeltétel *tetszőleges* $f(\vartheta, \phi)$ szórásamplitúdó mellett kielégíti a Schrödinger egyenletet $O\left(\frac{1}{r}\right)$ rendben [az egyszerűség kedvéért foglalkozzunk csak rugalmas szórásokkal, amelyekre $|\mathbf{k}_i| = k$; továbbá használjuk fel a következő összefüggéseket: $U = V/(\hbar^2/2\mu)$, $\Delta_{\mathbf{r}} = \nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{\mathbf{L}^2/\hbar^2}{r^2}$, $E = (\hbar k)^2/2m$]:

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow \infty} \left[\Delta_{\mathbf{r}} + k^2 - U(\mathbf{r}) \right] \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)} &= \left[\Delta_{\mathbf{r}} + k^2 - Cr^{-1-\epsilon} \right] A \left(e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}} + f(\vartheta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right) \\ &= A \left[-k^2 e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}} + k^2 e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}} - Cr^{-1-\epsilon} e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}} + \Delta_{\mathbf{r}} f(\vartheta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} + k^2 f(\vartheta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} - \right. \\ &\quad \left. - Cr^{-1-\epsilon} f(\vartheta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right] = A \left[-Cr^{-1-\epsilon} e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}} + f(\vartheta, \phi) \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\mathbf{L}^2/\hbar^2}{r^2} f(\vartheta, \phi) + \right. \\ &\quad \left. + k^2 f(\vartheta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} - Cr^{-1-\epsilon} f(\vartheta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right] = A \left[-Cr^{-1-\epsilon} \left(e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}} + f(\vartheta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right) - \right. \\ &\quad \left. - k^2 f(\vartheta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} + k^2 f(\vartheta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right] + O\left(\frac{1}{r^3}\right) = -ACr^{-1-\epsilon} \left(e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}} + f(\vartheta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right) = \\ &= 0 + O\left(\frac{1}{r}\right). \end{aligned}$$

Így tehát (73) a lehető legáltalánosabb határfeltétel, amelyhez a következő szemléltetés fűződik. (73) két hullám szuperpozíciójából áll. Mindkettő kielégíti a Schrödinger egyenletet $r \rightarrow \infty$ -ben $O(1/r)$ rendben, rövidhatótávolságú potenciál esetén.



(73) első tagja egy *beeső* végtelen síkhullámot (impulzus sajátállapotot) ír le, ami a bombázó részecske-hullámmal azonosítható. (73) második tagja egy olyan radiális *szórt* hullámot reprezentál, amely a szórás centrumától kifelé mozog, amplitúdója irányfüggő, intenzitása r^2 -tel fordítottan arányos (kifutó gömbhullámnak nevezzük; 37. ábra). Ez felel meg a detektálandó részecske-hullámnak.

Az egyenlő fázisú felületek egyenletei:

a) beeső hullám esetén

$$\mathbf{k}_i \mathbf{r} - \omega t = |\mathbf{k}_i| r \cos \vartheta - \omega t = kz - \omega t = \text{const} = a(z, t);$$

az egyenlő fázisú pontok összessége z -re merőleges felületeket alkot, amely felületek $\lambda = 2\pi/k$ távolságra vannak egymástól, amennyiben a maximumokat, vagy minimumokat tekintjük egy rögzített t időpillanat esetén. E felületek $v_f = \omega/k$ fázissebességgel haladnak a pozitív z irányba;

b) rugalmasan szórt hullám esetén

$$kr - \omega t = \text{const} = b(r, t);$$

ez egy olyan gömbfelület egyenlete, amely $\omega/k = \lambda/T = v_f$ (fázis)sebességgel $\hat{\mathbf{r}}$ irányba terjed $2\pi/k$ hullámhosszal.

Magyarázat: Stacionárius esetben a fázisokhoz mindig hozzáadandó a lezeparált $\exp(-\frac{i}{\hbar}Et)$ tényező fázisa. További elemi összefüggések: $E = \hbar\omega = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m \rightarrow \omega = \hbar k^2/2m$. Fázissebesség: $dr/dt = d(\text{const}/k + \omega t/k)/dt = \omega/k = \hbar k/2m = v/2$, ahol v a csoportsebesség, amit $d\omega/dk$ definiál.

Az A együttható és az f szórásamplitúdó fizikai jelentésének megállapítása céljából kiszámítjuk a *differentiális hatáskeresztmetszetet* mint a detektornál ($r \rightarrow \infty$ -ben) $\vartheta, \phi = \hat{\mathbf{r}}$ irányban mérhető fluxus és a beeső hullámból származó, szintén mérhető fluxus hányadosát. A detektornál észlelt fluxus a ψ_{sz} szórt hullámból, valamint a bejövő és szórt hullám interferenciájából ered. Megmutatjuk, hogy az interferencia tagból eredő részecske-hullám fluxusa elhanyagolható $r \rightarrow \infty$ -ben $\vartheta \neq 0$ esetén.

Az egységnyi felületre eső fluxust a valószínűségi áramsűrűség képlete

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \nabla_{\mathbf{r}} \psi - \psi \nabla_{\mathbf{r}} \psi^*] = \Re \left(\frac{\hbar}{mi} \psi^* \nabla_{\mathbf{r}} \psi \right) = \mathbf{j}_{be} + \mathbf{j}_{sz} + \mathbf{j}_{int}$$

szolgáltatja (dimenziója: $\frac{rmv}{mr} \frac{1}{r^3} = \frac{1}{s \text{ cm}^2}$). Figyelembe vesszük továbbá, hogy

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \nabla_{\mathbf{r}} = \lim_{r \rightarrow \infty} \left(\frac{\partial}{\partial r} \hat{\mathbf{r}}, \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \hat{\vartheta}, \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \phi} \hat{\phi} \right) = \frac{\partial}{\partial r} \hat{\mathbf{r}}.$$

A beeső részecske-hullám áramsűrűség vektora a $\Phi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = Ae^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}}$ beeső hullámból [(73) első tagja] számolható:

$$\mathbf{j}_{be} = \Re \left(\frac{\hbar}{mi} \Phi_{be}^* \nabla_{\mathbf{r}} \Phi_{be} \right).$$

A bejövő fluxus, amit $\mathbf{k}_i$ -ra merőleges egységnyi felületen detektálunk (és amivel osztani fogjuk a detektornál mérhető részecske fluxust) a következő:

$$J_0 \equiv j_{be} = \mathbf{j}_{be} \hat{\mathbf{k}}_i = \hat{\mathbf{k}}_i \Re \left(\frac{\hbar}{mi} |A|^2 e^{-i\mathbf{k}_i \mathbf{r}} i\mathbf{k}_i e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}} \right) = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} = |A|^2 v.$$

A kifutó szórt hullám (ψ_{sz}) áramsűrűség vektora

$$\mathbf{j}_{sz} = \Re \left(\frac{\hbar}{mi} \psi_{sz}^* \nabla_{\mathbf{r}} \psi_{sz} \right)$$

Ebből $\hat{\mathbf{r}}$ irányba a detektorhoz

$$\begin{aligned} j_{sz} &= \hat{\mathbf{r}} \mathbf{j}_{sz} = \Re \left(|A|^2 \frac{\hbar}{mi} f^*(\Omega) \frac{e^{-ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(f(\Omega) \frac{e^{ikr}}{r} \right) \right) \\ &= |A|^2 \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{r^2} |f(\Omega)|^2 + O\left(\frac{1}{r^3}\right) = |A|^2 v \frac{1}{r^2} |f(\Omega)|^2 + O\left(\frac{1}{r^3}\right) \end{aligned}$$

egységnyi felületre eső fluxus érkezik.

Vizsgáljuk most az interferencia tagból adódó radiális áramsűrűséget (fluxust).

$$\begin{aligned} j_{int} &= \mathbf{j}_{int} \hat{\mathbf{r}} = \Re \left\{ |A|^2 \frac{\hbar}{mi} \left[e^{-ikr \cos \vartheta} \frac{\partial}{\partial r} \left(f(\Omega) \frac{e^{ikr}}{r} \right) + f^*(\Omega) \frac{e^{-ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} e^{ikr \cos \vartheta} \right] \right\} \\ &= \Re \left\{ |A|^2 \frac{\hbar}{mi} \left[ik \frac{1}{r} f(\Omega) e^{ikr(1-\cos \vartheta)} + ik \cos \vartheta \frac{1}{r} f^*(\Omega) e^{-ikr(1-\cos \vartheta)} \right] + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \right\} \approx 0, \end{aligned}$$

mivel (hacsak $\vartheta \neq 0$, előreszórás esete, amelyet később külön megvizsgálunk) igen gyorsan oszcillál, mint r függvénye, amikor $r \rightarrow \infty$. Továbbá, vegyük figyelembe, hogy a bejövő hullám $\mathbf{k}_i$ vektorának mindig van szórása ($\Delta \mathbf{k}$). Ebben az esetben az oszcillációs tagok elhanyagolhatók $\vartheta \neq 0$ -ra, mivel

$$\begin{aligned} &\lim_{r \rightarrow \infty} \int_k^{k+\Delta k} k e^{ikr(1-\cos \vartheta)} dk \\ &= \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{1}{ir(1-\cos \vartheta)} \left\{ \left[k e^{ikr(1-\cos \vartheta)} \right]_k^{k+\Delta k} - \int_k^{k+\Delta k} e^{ikr(1-\cos \vartheta)} dk \right\} \\ &= \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{1}{ir(1-\cos \vartheta)} \left[(k+1) e^{ikr(1-\cos \vartheta)} \right]_k^{k+\Delta k} \\ &= \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{1}{ir(1-\cos \vartheta)} \left[(k+\Delta k-1) e^{i(k+\Delta k)(r-z)} - (k-1) e^{ik(r-z)} \right] \\ &= \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{1}{i(r-z)} e^{ik(r-z)} \left[(k+\Delta k-1) e^{i\Delta k z} - k+1 \right] = 0. \end{aligned}$$

Végeredményben tehát, ahhoz, hogy megkapjuk a differenciális hatáskeresztmetszetet, (72a) értelmében a szórt részecskék $dN = j_{sz} \times r^2 \times d\Omega$ számát el kell osztani a beeső részecskék $J_0 = j_{be}$ fluxusával és $d\Omega$ -val:

$$\sigma(\vartheta, \phi) = \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dN}{J_0 d\Omega} = \frac{d\Omega r^2 j_{sz}}{j_{be} d\Omega} = \frac{r^2 |A|^2 v \frac{1}{r^2} |f|^2}{|A|^2 v} = |f(\vartheta, \phi)|^2.$$

Azt kaptuk, hogy a szórásamplitúdó abszolút érték négyzete megegyezik a differenciális hatáskeresztmetszettel:

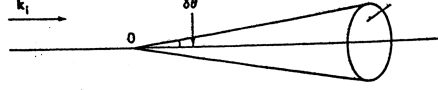
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta, \phi)|^2. \quad (74)$$

Ez az a fundamentális összefüggés, amely kapcsolatot teremt a tapasztalat és az elmélet között.

Mint látjuk, a differenciális hatáskeresztmetszet független az A amplitúdótól mivel csak "relatív" valószínűség iránt érdeklődünk mindenkor. Ezért a szórási hullámfüggvényt különbözőképpen lehet "normálni", attól függően, hogy miként választjuk meg az A "normálási" együtthatót. Ha $A = 1$ normálást választunk, akkor a bejövő hullám megtalálási valószínűségi sűrűsége 1 az $\mathbf{r}$ -térben. Ha $A = 1/\sqrt{v} = 1/\sqrt{\hbar k}$, akkor a szórási hullámfüggvényt egységnyi bejövő fluxusra normáltuk. Φ_{be} -re választhatunk hullámcsomag megoldást is, a feladathoz illeszkedő $A(p)$ normálási amplitúdó rögzítésével együtt.

6.3.3. OPTIKAI TÉTEL.

$\vartheta \approx 0$ esetén az interferencia tag nem hanyagolható el. Számítsuk ki e tagból jövő áramsűrűséget, amelyet egy $\delta\theta$ nyílásszögű kúpfelületen r távolságban detektálunk (38. ábra).



38. ábra. A $\delta\theta$ nyílásszögű kúp szemléltetése.

A $\delta\theta$ nyílásszögű $r^2\delta\Omega$ területű kúpfelületen áthaladó részecskék száma $O(\frac{1}{r^2})$ rendben:

$$j_{int}(\delta\theta \approx 0) = r^2 \int_{\delta\Omega} d\Omega \mathbf{j}_{int} \hat{\mathbf{r}} = r^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\delta\theta} d\vartheta \sin \vartheta \\ \times \Re \left\{ |A|^2 \frac{\hbar}{mi} \left[ik \frac{1}{r} f(\Omega) e^{ikr(1-\cos \vartheta)} + ik \cos \vartheta \frac{1}{r} f^*(\Omega) e^{-ikr(1-\cos \vartheta)} \right] \right\}.$$

Az integrál kiértékeléséhez figyelembe vesszük, hogy $f(\Omega)$ lassan változó függvénye ϑ -nak s ezért a nulla helyen felvett értékével helyettesíthető. Vezessük be az $x = \cos \vartheta$ változót. Ekkor $dx = -\sin \vartheta d\vartheta$.

Vegyük figyelembe, hogy

$$\int_0^{\delta\theta} d\vartheta \sin \vartheta e^{ikr(1-\cos \vartheta)} = - \int_1^{\cos \delta\theta} dx e^{ikr(1-x)} = -e^{ikr} \int_1^{\cos \delta\theta} dx e^{-ikrx} \\ = -e^{ikr} \frac{1}{-ikr} [e^{-ikrx}]_1^{\cos \delta\theta} = \frac{e^{ikr}}{ikr} [e^{-ikr \cos \delta\theta} - e^{-ikr}] \\ = \frac{1}{ikr} e^{ikr(1-\cos \delta\theta)} + \frac{i}{kr} = \text{oszc.} + \frac{i}{kr},$$

ahol az oszcilláló rész elhagyható a nem oszcilláló mellett. Így, folytatva az interferencia tagból jövő áramsűrűség kiértékelését ($\cos \vartheta \approx 1$ miatt),

$$j_{int}(0) = \lim_{\delta\theta \rightarrow 0} j_{int}(\delta\theta) = 2\pi r^2 |A|^2 \frac{\hbar k}{mr} \Re \left[f(0) \frac{i}{kr} + f^*(0) \frac{i^*}{kr} \right] \\ = 2\pi |A|^2 \frac{\hbar}{m} \Re [if(0) + i^* f^*(0)] = -4\pi \frac{\hbar}{m} |A|^2 \Im f(0).$$

Az interferencia tagból adódó részecske-hullám járuléka $\vartheta \approx 0$ esetén tehát arányos a szórásamplitúdó imaginárius részével ($\vartheta \neq 0$ esetén az ebből a tagból adódó áramsűrűség zérus, mint korábban láttuk.)

Ha a teljes $r \rightarrow \infty$ sugarú gömbfelületeire integráljuk a teljes radiális áramot, $j_r = \mathbf{j} \cdot \hat{\mathbf{r}}$ -t, fluxus megmaradást kapunk a Gauss tétel kihasználásával. Legyen $d\mathbf{f} = \hat{\mathbf{r}} r^2 d\Omega$ a felületelem, ekkor

$$r^2 \int d\Omega \mathbf{j} \hat{\mathbf{r}} \equiv \int_{\mathcal{F}} d\mathbf{f} \mathbf{j} = \int_{\mathcal{V}} d^3r \nabla \mathbf{j} = 0,$$

ami a

$$\nabla \mathbf{j} + \partial \rho / \partial t = 0$$

kontinuitási egyenlet integrális alakjából az $\int d^3r \rho(\mathbf{r}, t) = \int d^3r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = 1$ norma miatt következik. Mármint, a teljes áramsűrűség három részből tevődik össze: $\mathbf{j} = \mathbf{j}_{be} + \mathbf{j}_{sz} + \mathbf{j}_{int}$ és a bejövő részecskehullám áramsűrűsége nem ad járulékot a teljes radiális fluxushoz, ugyanis:

$$r^2 \int d\Omega \mathbf{j}_{be} \hat{\mathbf{r}} = r^2 2\pi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta |A|^2 v \cos \vartheta = 2\pi r^2 |A|^2 v \int_{-1}^1 dx \quad x = 0,$$

ahol a szokásos $x = \cos \vartheta$, $dx = -d\vartheta \sin \vartheta$ helyettesítést alkalmaztuk.

Ezért a teljes fluxushoz csak $\mathbf{j}_{sz}$ és $\mathbf{j}_{int}$ ad járulékot, az utóbbi csak $\theta \approx 0$ esetén, mint láttuk, az előbbi pedig a (differenciális) hatáskeresztmetszettel kapcsolatos. Írható tehát

$$\begin{aligned} 0 &= r^2 \int d\Omega (\mathbf{j}_{sz} + \mathbf{j}_{int}) \hat{\mathbf{r}} = r^2 \int d\Omega |A|^2 v \frac{1}{r^2} |f(\Omega)|^2 - 4\pi |A|^2 \frac{\hbar}{m} \Im f(0) \\ &= |A|^2 \left(v \sigma_{tot} - 4\pi \frac{\hbar}{m} \Im f(0) \right) = 0, \end{aligned}$$

amiből nyerjük a nevezetes *optikai tételt*:

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k} \Im f(0). \quad (75)$$

Az optikai tétel rendkívül fontos mind elméleti, mind gyakorlati szempontból. Kapcsolatot teremt kísérlet és elmélet között. Lehetővé teszi a nem teljes (ϑ, ϕ) szögtartományban végrehajtott mérésekből történő teljes hatáskeresztmetszet meghatározását. Ezenkívül az elméleti modellek, illetve közelítések számára is támpontot jelent a (75) alatti egzakt összefüggés.

6.4. SZÓRÓDÁS GÖMBSZIMMETRIKUS POTENCIÁLON.

PARCIÁLIS HULLÁMOK MÓDSZERE.

Tekintsük a

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) - E \right] \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}) = 0$$

Schrödinger egyenletet, ahol a potenciál csak $|\mathbf{r}| = r$ abszolút értékétől függ [$|\mathbf{k}_i| = k, E = (\hbar k)^2/2\mu > 0, \mu$ a redukált tömeg].

Mármost, tetszőleges $\psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r})$ reguláris függvény sorbafejthető az impulzusmomentum sajátfüggvényei, a gömbfüggvények szerint

$$\psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{lm}(\mathbf{k}_i) u_{lm}(\mathbf{k}_i, r) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l'(k) u_l(k, r) P_l(\cos \vartheta), \quad (76a)$$

ahol a második egyenlőség jel utáni átalakításban kihasználtuk, hogy a potenciál csak r -től függ, és ezért — a z -tengelyt a beesés $\hat{\mathbf{k}}_i$ irányával párhuzamosnak választva, valamint a

$$\sum_m Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{k}}_i) = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \vartheta)$$

összegzési tételre figyelemmel, — a mágneses kvantumszámra vonatkozó összegzés elvégezhető, és a hullámfüggvény csak r -től és ϑ -tól függő formára egyszerűsödik. A szórási hullámfüggvény (73) aszimptotikus alakjában fellépő f szórásamplitúdó ezért szintén csak ϑ függvénye lesz. Így az aszimptotikus alak gömbszimmetrikus potenciál esetén

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)} = A \left(e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}} + f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \right). \quad (76b)$$

Behelyettesítve a (76a) alatti kifejtést a Schrödinger egyenletbe, kapjuk a "parciális" (azaz: rész) hullámokra felírt Schrödinger egyenletet:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E \right] u_l(r) = 0, \quad (76c)$$

amelyből az

$$u_l(r) = \frac{1}{kr} R_l(r)$$

helyettesítés útján nyerjük az ún. *radiális* szórási Schrödinger egyenletet

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E \right] R_l(r) = 0, \quad (76d)$$

az $R_l(r)$ *radiális* hullámfüggvényre. (Figyeljük meg, hogy R_l most nem függ a kötött állapotokra jellemző n kvantumszámtól, hiszen folytonos spektrum esetében vagyunk; n a hullámfüggvény nódusaival, csomópontjaival is kapcsolatos volt — egy szórási hullámfüggvény végtelen sok nódussal rendelkezik, hiszen térben nem lokalizált.)

(76d) megoldásához ismernünk kell $u_l(r)$ -t két pontban. Ez $r = 0$ és $r = \infty$ lesz.

A hidrogénatom tárgyalásánál láttuk, hogy amennyiben a $V(r)$ potenciál nem szingulárisabb $1/r$ -nél, akkor az ún. indiciális (az origóbeli megoldások hatványkitevőire vonatkozó) egyenletek vizsgálatából

$$u_l(r \rightarrow 0) \propto \begin{cases} r^l & \text{reg} \\ r^{-l-1} & \text{irreg} \end{cases}$$

következett, ami az $R_l(r) = kr u_l(r)$ radiális függvényre a

$$R_l(r \rightarrow 0) \propto \begin{cases} r^{l+1} & \text{reg} \\ r^{-l} & \text{irreg} \end{cases}$$

határfeltételt szolgáltatja. A hullámfüggvényre vonatkozó regularitási követelmény miatt tehát az origóbeli határfeltétel

$$u_l(0) = \begin{cases} \text{konst.}, & \text{ha } l=0, \\ 0 & \text{egyébként,} \end{cases} \quad \text{illetve } R_l(0) = 0, \quad l = 0, 1, \dots \quad (77)$$

Az $r \rightarrow \infty$ -beli határfeltétel megállapítása céljából válasszuk először (76d)-ben r -et olyan nagynak, hogy mind $V(r)$, mind a centrifugális tag, $l(l+1)/r^2$, elhanyagolható legyen. Ekkor

$$R_l(r \rightarrow \infty; k) \propto e^{\pm ikr} \quad (78a)$$

nyilvánvalóan kielégíti az egyenletet ($E = \hbar^2 k^2 / 2m$). Jobb közelítést kapunk, ha ezt az extrém aszimptotikus alakot kiegészítjük egy $f(r)$ függvénnyel a következő módon:

$$R_l(r \rightarrow \infty; k) = \lim_{r \rightarrow \infty} A e^{\pm ikr + \int_a^r f(r') dr'}, \quad (78b)$$

ahol A és a konstansok. Behelyettesítve (76d)-be, a következő differenciál egyenletet nyerjük f -re:

$$f' + f^2 \pm 2ikf = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \equiv W(r). \quad (78c)$$

Mármint, ha $W(r) \propto r^{-s}$, akkor a baloldal utolsó tagja, lévén nagyságrendben a vezető tag, szintén r^{-s} -ként tart zérushoz. Így az exponensben álló integrál

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \int_a^r (r')^{-s} dr' = \frac{1}{1-s} \left[\lim_{r \rightarrow \infty} r^{1-s} - a^{1-s} \right] \quad (78d)$$

konvergens, ha $s > 1$, és akkor (78b) szintén (78a) alakjában írható. Amennyiben $W(r)$ exponenciálisan tűnik el és $l = 0$, a (78c) bal oldalán álló f' -s tagot is figyelembe kell venni f mellett. Nehézség nélkül megmutatható, hogy ekkor is (78a) az általános alak. Az egyetlen kivételre, $s = 1$ esetére, a Coulomb szórás tárgyalásánál még visszatérünk.

A (78a) végtelenbeli határfeltételek fizikai jelentése nyilvánvaló: e^{ikr} az $\hat{\mathbf{r}}$ irányba *szórt* (*kifutó*), az e^{-ikr} az $\hat{\mathbf{r}}$ irányból *beeső* (*befutó*) hullámot jelenti. Ez a két hullám keveredik mindegyik $R_l(r; k)$ parciális hullámban nagy r -ek esetén, ami ezért a következő legáltalánosabb formába írható:

$$R_l(r \rightarrow \infty; k) = \tilde{A}_l \sin(kr + \tilde{\delta}_l), \quad (79)$$

ahol a két integrációs állandó, $\tilde{A}_l$ és $\tilde{\delta}_l$ elvben még komplex is lehet. A befutó és kifutó hullám keveredési amplitúdóját ez a két állandó határozza meg.

A (76d) radiális parciális szórási Schrödinger egyenlet $R_l(r; k)$ megoldásait tehát a (77) és (79) határfeltételek egyértelműen meghatározzák (egy komplex szorzási állandótól eltekintve). A megoldás azonban valós, mivel $r = 0$ -ban valósként indul, és k , V , és l valós. Így $\tilde{\delta}_l$ -nek is valósnak kell lenni, $\tilde{A}_l$ viszont lehet komplex. $\tilde{\delta}_l$ valós esetén megmutatható, hogy a (76a) részecske-hullámból eredő totális radiális fluxus egy teljes (végtelenbeli) gömbfelületen zérus:

$$\begin{aligned}
& \lim_{r \rightarrow \infty} r^2 \int d\Omega \mathbf{j}\hat{\mathbf{r}} = \lim_{r \rightarrow \infty} r^2 \int d\Omega \Re \left(\frac{\hbar}{mi} \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)*} \frac{\partial}{\partial r} \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)} \right) \\
&= \lim_{r \rightarrow \infty} r^2 2\pi \Re \sum_{l'} \left(\frac{\sin(kr + \tilde{\delta}_l)}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\sin(kr + \tilde{\delta}_{l'})}{r} \right) \int d\vartheta \sin \vartheta P_l(\cos \vartheta) P_{l'}(\cos \vartheta) \frac{\hbar}{mi} \tilde{A}_l^* \tilde{A}_{l'} \\
&= 2\pi \sum_{l=0}^{\infty} |\tilde{A}_l|^2 \lim_{r \rightarrow \infty} r^2 \Re \left(\frac{\sin(kr + \tilde{\delta}_l)}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\sin(kr + \tilde{\delta}_l)}{r} \right) \frac{\hbar}{mi} \\
&= \pi \Re \frac{\hbar k}{mi} \sum_{l=0}^{\infty} |\tilde{A}_l|^2 \sin 2(kr + \tilde{\delta}_l) = 0, \quad \text{ha} \quad \tilde{\delta}_l^* = \tilde{\delta}_l
\end{aligned}$$

ahol $\tilde{A}_l$ tartalmazza a (76a)-ban előforduló $c'_l(k)$ együtthatót is.

Amennyiben $\tilde{\delta}_l$ valós, a fenti eredmény tehát azt jelenti, hogy a szórási tértartományon belül a részecskéknak nincs forrása, illetve "elnyelője". A kifelé szóródott részecskék ezért egyedül a beeső részecske-hullámból származhatnak. Komplex potenciál esetén $\tilde{\delta}_l$ komplex és ezért a teljes fluxus az r gömbfelületen nem tűnik el; ezzel reakciók lefolyását és rugalmatlan ütközések bekövetkeztét lehet modellezni (ld. Feshbach-, ill. Watson-féle optikai potenciál formalizmus).

Általában nem a végtelenbeli (79) határfeltétellel dolgozunk, hanem kihasználjuk azt, hogy a gyakorlatban a potenciál egy *véges* r_0 távolságon túl zérusnak vehető. Az r_0 távolság viszont még nem olyan nagy, hogy a centrifugális tag elhanyagolható lenne. A (76d) Schrödinger egyenlet ebben az esetben a Bessel-féle differenciál egyenletbe megy át ($V = 0$, $E = \hbar^2 k^2 / 2m$):

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] R_l^{sz}(r) = 0, \quad r > r_0, \quad (80)$$

amelyet "szabad" radiális Schrödinger egyenletnek is szoktunk hívni. Két független megoldása a $j_l(kr)$ *szférikus Bessel*- és az $n_l(kr)$ *szférikus Neumann-függvény*nyel kapcsolatos:

$$R_l^{reg}(kr) = kr j_l(kr) = \left(\frac{\pi kr}{2} \right)^{1/2} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \rightarrow \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi), \quad \text{ha} \quad r \rightarrow \infty,$$

$$R_l^{irreg}(kr) = -kr n_l(kr) = (-1)^l \left(\frac{\pi kr}{2} \right)^{1/2} J_{-l-\frac{1}{2}}(kr) \rightarrow \cos(kr - \frac{1}{2}l\pi), \quad \text{ha} \quad r \rightarrow \infty.$$

Az $R_l(r; k)$ radiális szórási hullámfüggvény kifejezhető R_l^{reg} és R_l^{irreg} lineárkombinációjaként r_0 -nál nagyobb távolságokra:

$$\begin{aligned}
R_l^{(a)} &= R_l(r; k) = \tilde{A}_l [R_l^{reg}(kr) \cos \delta_l + R_l^{irreg}(kr) \sin \delta_l] = \\
&= \tilde{A}_l kr [j_l(kr) \cos \delta_l - n_l(kr) \sin \delta_l], \quad r > r_0, \quad (81a)
\end{aligned}$$

amelynek aszimptotikus alakja – figyelembe véve j_l és n_l feltüntetett aszimptotikus tulajdonságait – (79)-al ekvivalens formába írható:

$$R_l^{(a)} = R_l(r \rightarrow \infty; k) = \tilde{A}_l [\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi) \cos \delta_l + \cos(kr - \frac{1}{2}l\pi) \sin \delta_l] = \tilde{A}_l \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l), \quad (81b)$$

és így

$$u_l(r \rightarrow \infty; k) = \tilde{A}_l(kr)^{-1} \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l). \quad (81c)$$

Ismervén az u_l és R_l parciális hullámok aszimptotikus alakját, meghatározhatjuk a differenciális hatáskeresztmetszetnek az egyes parciális hullámokból adódó összetevőit. Ehhez nem kell mást tenni, mint (76a) és (76b) aszimptotikus alakjait összehasonlítani. Ennek érdekében a (76b)-ben fellépő $e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}$ függvényre (síkhullámra) alkalmazzuk az ismert kifejtési tételt, egyúttal vesszük a limeszt is:

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} &= \lim_{r \rightarrow \infty} e^{ikz} = \lim_{r \rightarrow \infty} e^{ikr \cos \vartheta} = \lim_{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \vartheta) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l (kr)^{-1} \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi) P_l(\cos \vartheta). \end{aligned}$$

Ezt behelyettesítjük (76b)-be és az így kapott kifejezést egyenlővé tesszük (76a) aszimptotikus alakjával, amit (81c) felhasználásával kapunk. Tehát:

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l (kr)^{-1} \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi) P_l(\cos \vartheta) + f(\vartheta) r^{-1} e^{ikr} \\ = \sum_{l=0}^{\infty} A_l(k) (kr)^{-1} \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l) P_l(\cos \vartheta), \end{aligned}$$

ahol most A_l tartalmazza a (76a)-ban fellépő c_l' együtthatókat is, osztva a (76b)-beli általános (l -től független) A állandóval. Az egyenlet bal- és jobboldalán álló e^{ikr} és e^{-ikr} függvények együtthatói egyenlők kell legyenek, azaz $[\sin x = (\exp(ix) - \exp(-ix))/2i]$

$$2ikf(\vartheta) + \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l e^{-\frac{1}{2}il\pi} P_l(\cos \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l e^{i(\delta_l - \frac{1}{2}l\pi)} P_l(\cos \vartheta)$$

és

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l e^{\frac{1}{2}il\pi} P_l(\cos \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l e^{-i(\delta_l - \frac{1}{2}l\pi)} P_l(\cos \vartheta)$$

Mint hogy ez igaz ϑ minden értékére és a Legendre polinomok ortogonálisak egymásra, az utóbbi egyenletből meghatározhatjuk az l -edik parciális hullám (aszimptotikus) normálási együtthatóját:

$$A_l = (2l+1) i^l e^{i\delta_l}.$$

Ezt behelyettesítve az előbbibe, kapjuk a kívánt összefüggést a szórásamplitúdó parciális hullámok szerint kifejtett alakjára:

$$\begin{aligned} f(\vartheta) &= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \vartheta) \\ &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \vartheta), \end{aligned} \quad (82)$$

ugyanis

$$\frac{1}{2i}(e^{2i\delta_l} - 1) = \sin \delta_l e^{i\delta_l}.$$

Minthogy $P_l(1) = 1$ bármely l -re, az előreszórás szórási amplitúdója:

$$\begin{aligned} f(0) &= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1) \\ &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)e^{i\delta_l} \sin \delta_l, \end{aligned}$$

és ennek imaginárius része (ami az optikai tételben játszott szerepet):

$$\Im f(0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l.$$

A differenciális hatáskeresztmetszet a szórásamplitúdó abszolútérték négyzete:

$$\begin{aligned} \sigma(\vartheta) &= |f(\vartheta)|^2 = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \vartheta) \right|^2 \\ &= \frac{1}{k^2} \sum_{l \geq l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) \sin \delta_l \sin \delta_{l'} P_l(\cos \vartheta) P_{l'}(\cos \vartheta) \cos(\delta_l - \delta_{l'}) (2 - \delta_{ll'}), \\ &= \frac{1}{4k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(S_l - 1) P_l(\cos \vartheta) \right|^2, \end{aligned} \quad (83)$$

ahol az $S_l \equiv e^{2i\delta_l}$ jelölést alkalmaztuk. (Potenciálszórás esetén ez az "S-mátrix" elem.)

A teljes hatáskeresztmetszet ennek teljes térre vett integrálja. Kihasználva a Legendre polinomok ortogonalitását, kapjuk:

$$\sigma_{tot} = 2\pi \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \sigma(\vartheta) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell. \quad (84)$$

Ezt összehasonlítva az előreszórás szórási amplitúdó imaginárius részére kapott előbbi képlettel, nyerjük

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k} \Im f(0),$$

ami a már korábbról ismert általánosan érvényes optikai tétel újbóli kifejeződése a szférikus potenciálok speciális esetére. Az optikai tétel szemléletes fizikai jelentése a következő. Ahhoz, hogy szóródás bekövetkezzon, részecskét kell a beeső nyalábból eltávolítani, és ez nyilván a szórási hatáskeresztmetszettel arányos mértékű. A beeső nyaláb intenzitása a szórási tartomány mögött ($\vartheta \approx 0$) kisebb, mint előtte. A gyengülés csak a bejövő és szóródó hullám interferenciája révén lehetséges. Az interferencia tag viszont lineáris a szórási amplitúdóban. Tehát az előreszórási tartományban ($\vartheta \approx 0$, ahol mindez lejátszódik) a szórási amplitúdó arányos kell legyen a hatáskeresztmetszettel.

A parciális hullámok módszerét nyilván akkor célszerű alkalmazni, ha csak kevés parciális hullám ad járulékot a szórásamplitúdóhoz. Ez akkor következik be, ha

- 1) a potenciál hatótávolsága (r_0) rövid, vagy ha
- 2) a szórási energia ($k^2/2$) kicsi.

Ugyanis $bp = L$ klasszikusan, ahol b az impakt paraméter, p az impulzus, L az impulzusmomentum, tehát

$$(r_0 \hbar k)^2 \sim \hbar^2 l_{max}(l_{max} + 1).$$

6.4.1. FÁZISTOLÁS.

Az előzőekben lépten-nyomon használt $\delta_l = \delta_l(k)$ konstans neve: *fázistolás* (phase shift), mivel éppen a hullámfüggvény fázisának a szabad megoldáshoz képesti eltolódását jelenti a (79) ill. (81) egyenletek alapján. A fázistolásoknak a szóráselméletben centrális szerepük van, mert mint láttuk, e mennyiség ismerete elegendő a hatáskeresztmetszet meghatározásához. A fázistolás ugyanazt a szerepet játssza a szórási állapotok meghatározásában, mint az E_n energiasajátérték a kötött állapotok jellemzésében. Valóban, többféle összefüggés állapítható meg az energiasajátértékek és a fázistolások között, a zérus energiájú kötött állapotok, illetve a zérus energiájú szórás vizsgálata révén (Levinson tétel, kvantum-defekt elmélet, stb.).

Mint láttuk, a fázistolás ismerete egy normálási állandótól eltekintve egyértelműen rögzíti a szórási hullámfüggvény (a szórási állapot) aszimptotikus alakját. A szóráselméletben (a folytonos spektrumok tanulmányozása esetén) mindig ez érdekel bennünket, mivel a hullámfüggvény aszimptotikus alakja tartalmazza a szórásamplitúdót, aminek abszolút érték négyzete adja a kísérletekkel összevethető differenciális hatáskeresztmetszet értékeket.

Mármost az a (látszólagos) ellentmondásos helyzet állt elő, hogy tulajdonképpen célunk, a mikrorészecskék (mikrorendszerek) közötti kölcsönhatás kifürkészésére felállított elméleti apparátus mintha nem érdeklődne a hullámfüggvény kis tartományú viselkedése iránt, noha a mikrokölcsönhatások nyilván itt fejtik ki hatásukat leginkább. Természetesen ez nincs így. Márcsak azért sem, mert a hullámfüggvényt egyértelműen meghatározza a kölcsönhatást tartalmazó Schrödinger egyenlet a két határfeltétellel együtt. Azaz a hullámfüggvény aszimptotikus tulajdonságait, és így a fázistolást is, egy előre megadott potenciál egyértelműen rögzíti.

A fázistolás differenciális meghatározása.

A fázistolások a hullámfüggvény folytonossága alapján $V(r > r_0) = 0$ típusú potenciál esetén könnyen meghatározhatók, mivel az aszimptotikus (81a) $R_l^{(a)}(r > a)$ megoldásoknak és első deriváltjaiknak folytonosan kell csatlakoznia az $R_l(r \leq a)$ belső megoldásokhoz, ill. deriváltjaihoz. Ezen folytonossági (regularitási) feltételt a logaritmikus deriváltak

$$\gamma_l(k) \equiv \left(\frac{d}{dr} \left[\ln \frac{1}{r} R_l \right] \right)_{r=r_0} = \left(\frac{d}{dr} \left[\ln \frac{1}{r} R_l^{(a)} \right] \right)_{r=r_0} = \left(\frac{d}{dr} \ln [j_l(kr) \cos \delta_l - n_l(kr) \sin \delta_l] \right)_{r=r_0},$$

egyenlősége révén teljesül, amiből

$$\tan \delta_l = \frac{k j_l'(kr_0) - \gamma_l(k) j_l(kr_0)}{k n_l'(kr_0) - \gamma_l(k) n_l(kr_0)},$$

révén kapjuk a kívánt képletet, ahol $'$ az argumentum szerinti deriválást jelenti.

A fázistolás integrális származtatása.

Kiindulunk a (76d) és (80) alatti egyenletből, amelyeket a jelölés szerint beszorozva és integrálva

$$\int_0^\infty dr R_l^{reg}(r) / \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) + k^2 \right] R_l(r) = 0,$$

$$\int_0^\infty dr R_l(r) / \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] R_l^{reg}(r) = 0,$$

két egyenletet kapunk, amelyeket egymásból kivonva nyerjük $[R_l^{reg} = r j_l(kr)$ és $R_l(r \rightarrow \infty) = \tilde{A}_l \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)]$:

$$\int_0^\infty [R_l^{reg} \frac{d^2}{dr^2} R_l - R_l \frac{d^2}{dr^2} R_l^{reg}] dr = \int_0^\infty R_l^{reg}(r) U(r) R_l(r) dr.$$

A baloldalon parciálisan integrálva és kihasználva az aszimptotikus alakokat, kapjuk a $-\tilde{A}_l k \sin \delta_l$ eredményt. Így a norma-független végeredmény:

$$\sin \delta_l = -\frac{2m}{\hbar^2} \tilde{A}_l^{-1} \int_0^\infty r j_l(kr) V(r) R_l(r) dr.$$

Összefüggés a potenciál és a fázistolás előjele között.

Vizsgáljuk most meg, hogy a δ_l fázistolás előjeléből lehet-e következtetést levonni a potenciálra vonatkozóan.

A reguláris szabad megoldás aszimptotikus alakja,

$$R_l^{reg}(r \rightarrow \infty) = \lim_{r \rightarrow \infty} r j_l(kr) = \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi),$$

amiből a szabad megoldás nódusainak (csomópontjainak) helyére

$$kr_{sz} - l\pi/2 = 0 \rightarrow r_{sz} = l\pi/2k$$

adódik. A teljes megoldás aszimptotikájából

$$R_l^{(a)} = R_l(r \rightarrow \infty) = \tilde{A}_l \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)$$

vizont

$$kr_t - l\pi/2 + \delta_l = 0 \rightarrow r_t = l\pi/2k - \delta_l/k = r_{sz} - \delta_l/k$$

adódik.

Mármint tekintsük a (39) ábrát, amelyen feltüntettük a reguláris szabad megoldásokat (szaggatott vonal) és a teljes megoldásokat (folytonos vonal) vonzó ($V < 0$) és taszító ($V > 0$) potenciál esetére. Az ábrát tanulmányozva nyilvánvaló, hogy $\delta_l > 0$ vonzó, $\delta_l < 0$ taszító potenciál jelenlétére utal.

Fontos megjegyezni, hogy δ_l csak mod π erejéig van meghatározva, mivel periódikus függvények argumentumaiban fordul elő. Abszolút értékét $\delta_l(k \rightarrow \infty) = 0$ rögzíti. Bizonyítás nélkül megemlíjtük, hogy e skálát használva, $\delta_l(k = 0) = n_l \pi$, ahol n_l a $V(r)$ potenciál által az l -ik parciális hullámban létesített kötött állapotok számát jelenti, amennyiben nincs zérus energián is kötött állapot (Levinson tétel).

Ramsauer-Townsend jelenség.

Vonzó potenciál esetén a fázistolás felveheti a π értéket. Ekkor a parciális hullám járuléka a szórásamplitúdóhoz (82) értelmében zérus. Rövidhatótávolságú potenciál esetén előfordulhat tehát az az eset, hogy $ka \sim l_{max} = 0$ miatt (ahol a a potenciál hatótávolsága) csak az s -hullám ad járulékot, ugyanakkor a potenciál eléggé vonzó ahhoz, hogy $\delta_0(k) = \pi$ legyen. Ekkor a hatáskeresztmetszet zérus: $\sigma_{tot}(k) \approx \frac{4\pi}{k} \sin^2 \delta_0(k) = 0$. Ez a kvalitatív magyarázata az elektron-nemesgáz atomok szórási hatáskeresztmetszeteiben $0.1 - 0.7$ eV között megfigyelt minimumnak, amelyet először *Ramsauer* és *Townsend* észlelt a 30-as évek elején (40. ábra).

6.4.2. LIPPMANN-SCHWINGER (LS) EGYENLET. BORN SOROZAT.

Tekintsük a

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}) = E \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}) \quad (85a)$$

szórási egyenletet [$E = (\hbar k)^2/2m$] a

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{+ikr}}{r} \quad (85b)$$

határfeltétel mellett. (A hullámfüggvényen szereplő (+) index a kifutó aszimptotikára utal.)

Írjuk át a Schrödinger egyenletet a

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}) = F_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}) \quad (85c)$$

inhomogén alakba, ahol az inhomogenitási tag,

$$F_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}), \quad (85d)$$

tartalmazza a köcsönhatást is.

(85c) formális megoldása a *Lippmann-Schwinger* (LS) *integrálegyenlet*:

$$\psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + \frac{2m}{\hbar^2} \int d\mathbf{r}' G^{(+)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}'), \quad (86)$$

ahol a $G^{(+)}$ Green-függvényt a

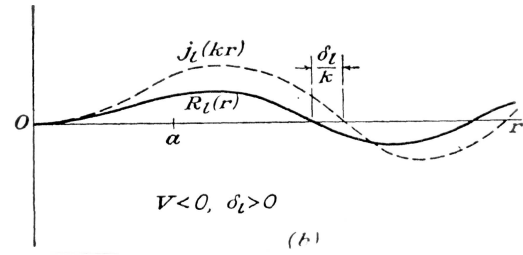
$$(\nabla^2 + k^2) G^{(+)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \equiv \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}')} d\mathbf{k}' \quad (87)$$

egyenlet definiálja.

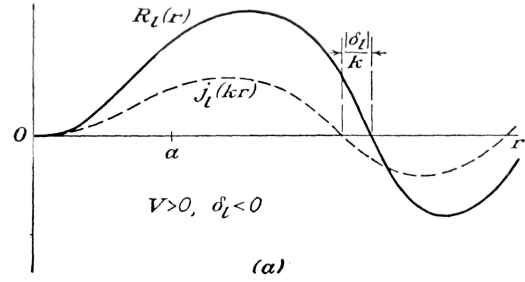
Behelyettesítve (86)-ot (85c)-be,

(87) kihasználásával azonosságot kapunk:

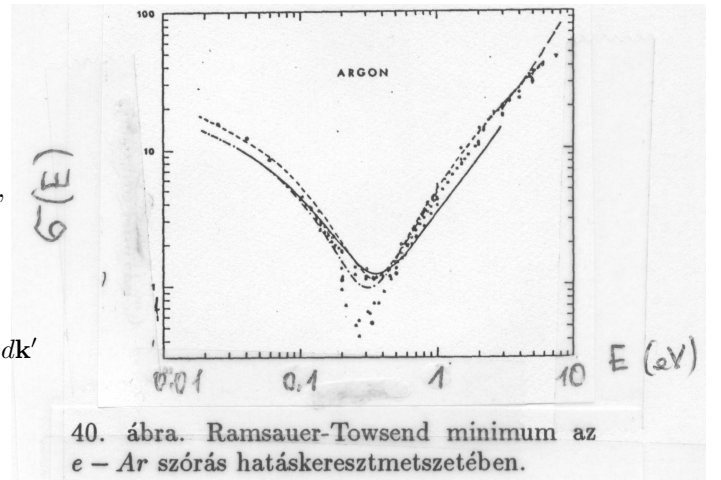
$$(\nabla_{\mathbf{r}}^2 + k^2) \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}) = (\nabla_{\mathbf{r}}^2 + k^2) e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}$$



39/a. ábra. Vonzó potenciál pozitív fázistolást okoz.



39/b. ábra. Taszító potenciál negatív fázistolást okoz.



40. ábra. Ramsauer-Townsend minimum az $e - \text{Ar}$ szórás hatáskeresztmetszeteiben.

$$\begin{aligned}
& + \frac{2m}{\hbar^2} \int d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}') = \\
& (-k^2 + k^2) e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}} + \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}) = F_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r})
\end{aligned}$$

Kimutatjuk, hogy a LS egyenlet magában foglalja a szórási határfeltételeket is. Ehhez első lépésként kiszámítjuk $G^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ -t a reziduuum tétel segítségével. Alkalmazva (87) mindkét oldalára $(\nabla^2 + k^2)$ inverzét, kapjuk

$$G^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = (\nabla^2 + k^2)^{-1} \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} d\mathbf{k}' = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{-k'^2 + k^2} d\mathbf{k}' = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

Az utolsó integrált komplex kontúrintegrálási technikával lehetett meghatározni, olyan utat választva, amely kifutó aszimptotikát biztosít a Green-függvény számára.

A Green-függvény eme konkrét alakját beírva a LS egyenletbe, kapjuk:

$$\begin{aligned}
\lim_{r \rightarrow \infty} \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}} - \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}') \\
&= e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}_f \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}') \equiv e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}} + f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad Q.E.D.
\end{aligned}$$

Itt felhasználtuk a következő összefüggést és definíciót:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} (k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = k\sqrt{r^2 - 2\mathbf{r}\mathbf{r}' + r'^2}) = kr\sqrt{1 - 2\mathbf{r}\mathbf{r}'/r^2} \approx kr(1 - \mathbf{r}\mathbf{r}'/r^2) = kr - k\frac{\mathbf{r}}{r}\mathbf{r}' \equiv kr - \mathbf{k}_f \mathbf{r}'$$

Meghatároztuk egyúttal a *szórásamplitúdó integrális alakját* is:

$$f_{\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f}(\vartheta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}_f \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}') \equiv -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle \Phi_{\mathbf{k}_f} | V | \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)} \rangle.$$

Ebből a felírásból világosan látszik, hogy a szórásamplitúdó annak valószínűségét fejezi ki, hogy a szóródó rendszer (target+lövedék) a kezdeti (i) kölcsönható $\psi_{\mathbf{k}_i}$ állapotból a végső (f) nemkölcsönható, azaz szabad, $\Phi_{\mathbf{k}_f}$ állapotba kerül át a $V(\mathbf{r})$ kölcsönhatás eredményeként.

Levezetés nélkül közöljük a LS egyenlet parciális hullámú alakját, amely gömbszimmetrikus potenciál esetén érvényes:

$$u_l(k; r) = j_l(kr) + \int_0^\infty G_l(r, r') \frac{2m}{\hbar^2} V(r') u_l(r') r'^2 dr',$$

ahol a Green-függvény az l -edik parciális hullámban:

$$G_l(r, r') = k j_l(kr_{<}) n_l(kr_{>}),$$

ahol $r_{>} = \max(r, r')$, $r_{<} = \min(r, r')$.

A LS egyenlet segítségével könnyen kiépíthető egy, a potenciál hatványai szerint haladó sorfejtésen alapuló, közelítő eljárás. Írjuk fel a LS egyenletet szimbolikus jelöléssel

$$\psi = \Phi_{\mathbf{k}_i} + GV\psi,$$

ahol GV nemlokális integráloperátort jelöl. A baloldalt folytonosan a jobboldalba helyettesítve, kapjuk a Born sorozatot:

$$\psi = \Phi_{\mathbf{k}_i} + GV\Phi_{\mathbf{k}_i} + GVG\Phi_{\mathbf{k}_i} + \dots \equiv \sum_{i=1}^{\infty} \psi_{B_i}.$$

A Born sorozatot felhasználhatjuk (gyenge potenciál, vagy nagy szórási energia esetén) az említett közelítő számítás kivitelezésére. Pl. az *első Born közelítést* kapjuk, ha ψ helyett ψ_{B1} -et használjuk. Így pl. a szórásamplitúdó első, ill. második Born közelítése

$$f_{B1}(\vartheta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle \Phi_{\mathbf{k}_f} | V \psi_{B1} \rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle \Phi_{\mathbf{k}_f} | V \Phi_{\mathbf{k}_i} \rangle,$$

$$f_{B2}(\vartheta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle \Phi_{\mathbf{k}_f} | V (\psi_{B1} + \psi_{B2}) \rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} (\langle \Phi_{\mathbf{k}_f} | V \Phi_{\mathbf{k}_i} \rangle + \langle \Phi_{\mathbf{k}_f} | VGV \Phi_{\mathbf{k}_i} \rangle).$$

Másik példaként a fázistolás első Born-közelítéses kifejezését írjuk fel. Kiindulva az integrális reprezentációból,

$$\sin \delta_l^{B1} = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r^2 j_l(kr) V(r) j_l(r).$$

6.4.3. COULOMB SZÓRÁS. MÓDOSÍTOTT COULOMB SZÓRÁS.

Két, q_1e és q_2e töltéssel rendelkező részecske közt ható Coulomb potenciál

$$V_c = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2 e^2}{r}$$

A hullámfüggvény aszimptotikus alakja Coulomb szórás esetén:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)} = e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r} + in \ln k(r-z)} + f_c(\vartheta) \frac{e^{ikr - in \ln 2kr}}{r},$$

ahol a Coulomb szórási amplitúdó analitikusan ismert:

$$f_c(\vartheta) = -\frac{n}{2k \sin^2 \vartheta/2} e^{2i(\delta_0^c - n \ln \sin \vartheta/2)},$$

ahol n a Sommerfeld paraméter: $n = m q_1 q_2 e^2 4\pi / \hbar^2 k \epsilon_0$, amelyben m a két részecske redukált tömegét jelenti és $\delta_0^c = \arg \Gamma(1 + in)$.

A Coulomb szórás differenciális hatáskeresztmetszete tehát:

$$\sigma_c(\vartheta) = |f_c(\vartheta)|^2 = \frac{n^2}{4k^2 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}}.$$

Ez a jól ismert Rutherford formula.

A Coulomb szórás teljes hatáskeresztmetszete végtelen: $\sigma_{tot}^c = \infty$. Ez annak folyománya, hogy az r^{-1} -es potenciál hosszúhatótávolságú. Még $l = \infty$ -ed rendben is módosítja a parciális hullámok fázisait, azaz az egymástól ∞ távolságra levő részecskék is hatással vannak egymásra.

A parciális hullámokra felírt radiális Schrödinger egyenlet Coulomb potenciál esetén

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V_c(r) - E \right] R_l(r) = 0.$$

Ennek két lineárisan független megoldása, az origóban reguláris, ill. irreguláris Coulomb hullámfüggvény:

$$\text{reg.} \quad F_l(k; r) \rightarrow r^{l+1}, \text{ ha } r \rightarrow 0; \quad \rightarrow \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi - n \ln 2kr + \delta_l^c), \text{ ha } r \rightarrow \infty,$$

$$\text{irreg.} \quad G_l(k; r) \rightarrow r^{-l}, \text{ ha } r \rightarrow 0; \quad \rightarrow \cos(kr - \frac{1}{2}l\pi - n \ln 2kr + \delta_l^c), \text{ ha } r \rightarrow \infty.$$

Itt a Coulomb szórás által okozott fázistolást $\delta_l^c = \arg \Gamma(l + 1 + in)$ jelenti. (A szórás végtelen hatótávolságára utal az aszimptotikus alak argumentumában előforduló logaritmikus tag is).

A fenti megoldások közismertek, konfluens hipergeometrikus függvényekkel kifejezhetők, kézikönyvekben megtalálhatók (ld. pl. Abramovitz).

Összefüggés a pozitív és negatív energiákhoz tartozó megoldások között.

Írjuk fel a radiális egyenletet az aszimptotikus ($r \rightarrow \infty$) tartományban:

$$R_l'' = \left(-k^2 + \frac{2m}{\hbar^2} V_c \right) R_l = \left(-k^2 + \frac{2nk}{r} \right) R_l.$$

Ennek megoldása $O(1/r^2)$ rendben:

$$R_l(r \rightarrow \infty) \propto e^{\pm i(kr - n \ln r)} \propto r^{ni} e^{ikr} = r^n e^{-\kappa r},$$

ahol az utolsó egyenlőség jel után a $k = i\kappa$ helyettesítést hajtottuk végre, amely negatív $E = k^2/2$ energiákra való áttérés esetén szükséges. Látjuk tehát, hogy a pozitív energiájú tartományból a negatív energiájúba való áttérés sima, ezenkívül visszakaptuk a hullámfüggvénynek a kötött állapotok esetén megismert exponenciálisan eltűnő aszimptotikus alakját. Az, hogy ez az átmenet ilyen sima két teljesen különböző fizikai jelenség (szórás és kötött állapot) között, messze nem magától értetődő, és a megoldások analitikus tulajdonságát tükrözi (ld. S-matrix elmélet, diszperziós relációk, stb.).

Módosított Coulomb szórás

Amennyiben a V_c Coulomb potenciál mellett még egy rövidhatótávolságú $\hat{V}$ is jelen van, módosított Coulomb szórásról beszélünk. Ebben az esetben tehát

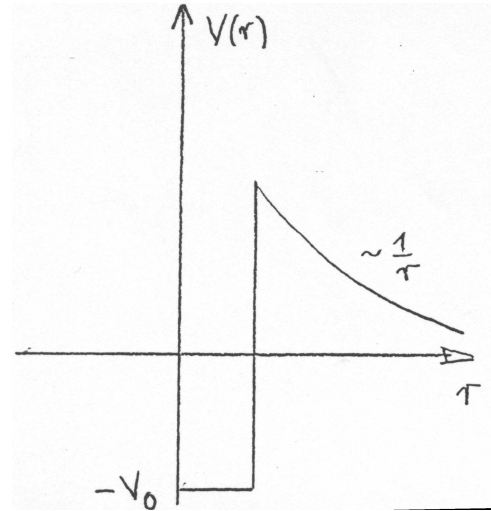
$$V = V_c + \hat{V},$$

ennek megfelelően a szórásamplitúdó:

$$f = f_c + \hat{f},$$

s a teljes fázistolás

$$\delta_l = \delta_l^c + \hat{\delta}_l.$$



Részletes, parciális hullámok szerinti analízissel megmutatható, hogy

$$\hat{f}(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{2i\delta_l^c} (e^{2i\hat{\delta}_l} - 1) P_l(\cos \vartheta)$$

ahol tehát $\hat{\delta}_l$ jelenti a rövidhatótávolságú potenciál okozta fázistolás (a Coulomb potenciál jelenléte mellett!).

A radiális hullámfüggvény a rövidhatótávolságú potenciál r_0 hatótávolságán kívül a Coulomb függvények lineáris kombinációjaként írható fel:

$$R_l(r > r_0) = F_l(k; r) + \tan \hat{\delta}_l G_l(k; r).$$

Ebből is meghatározható, hogy a módosított Coulomb szórás hullámfüggvényének aszimptotikus alakja:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi - n \ln 2kr + \delta_l^c + \hat{\delta}_l).$$

Rutherford híres szórás kísérletével éppen a módosított Coulomb szórásnak megfelelő hatáskeresztmetszet értékeket mérte ki, s a tiszta Coulomb szórástól való eltérésből következtethetett az atommag atomon belüli méretére.

7. MOZGÁS ELEKTROMÁGNESES TÉRBEN

Ebben a fejezetben elektromágneses tér jelenléte esetén vizsgáljuk a részecske mozgását. Foglalkozunk mind az időben változó, mind az időben állandó elektromos és mágneses tér elektronra gyakorolt hatásával. Látni fogjuk, hogy a klasszikus elektrodinamikában csupán segédmenyiségnek tekintett $\Phi(\mathbf{r}, t)$ elektromos és $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ mágneses vektorpotenciál mérésekkel kimutatható (nemlokális) hatást gyakorol az elektronra.

7.1. IDŐFÜGGŐ PERTURBÁCIÓSZÁMÍTÁS.

Amennyiben egy atomot fénnel besugárzunk, a foton elektromágneses tere erőhatást gyakorol a $-e$ töltésű elektronra. A mágneses erőhatás az alapállapotban lévő elektronra sokkal kisebb, mint az elektromos, ezért jó közelítésben a fénysugárzás hatását az elektromágneses tér

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_0 \sin \omega t$$

elektromos komponense okozza. Az elektronra gyakorolt erő és az ennek következtében keletkező potenciális energia egy $\mathbf{r}$ távolság megtétele után a következőképpen írható:

$$-\vec{\nabla} V = \mathbf{F} = -e\vec{\mathcal{E}}, \quad \rightarrow \quad V(\mathbf{r}, t) = \int_0^{\mathbf{r}} \mathbf{F} d\mathbf{s} = \mathbf{F}\mathbf{r} = e(\mathcal{E}_{0x}x + \mathcal{E}_{0y}y + \mathcal{E}_{0z}z) \sin \omega t.$$

Az elektron energiájának operátora

$$H = H_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}, t),$$

ahol H_0 meghatározza az elektron $\varphi_i(\mathbf{r})$ stacionárius állapotait,

$$H_0(\mathbf{r})\varphi_i(\mathbf{r}) = E_i\varphi_i(\mathbf{r}),$$

amelyeket ismertnek tételezünk fel. Az elektromágneses tér okozta $V(t)$ potenciális energia időfüggő, ezért az

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = [H_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}, t)] \Psi_i(\mathbf{r}, t)$$

állapotegyenlet nem szeparálható az $\mathbf{r}$ és t koordinátákban. (A továbbiakban az $\mathbf{r}$ -függés explicit feltüntetésétől általában eltekintünk, mert r jelölést fogunk használni a futó állapotindex kvantumszámra.) Ez azt is jelenti, hogy egy $\Psi_i(t)$ állapot nem írható fel a $\varphi_i e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t}$ stacionárius alakban, energiája nem lesz örökké E_i . A $\Psi_i(t)$ állapot időbeli változásának ismeretére azonban mégis szükségünk van az atomszínképek és az intenzitásviszonyok megértéséhez.

A megoldást az időfüggő (Dirac-féle) perturbációszámítás segítségével kapjuk meg.

Mivel a $\varphi_r e^{-\frac{i}{\hbar} E_r t}$ stacionárius megoldások teljes rendszert képeznek, kifejtethetjük szerintük a keresett $\Psi_i(t)$ állapotokat:

$$\Psi_i(t) = \sum_r c_{ri}(t) \varphi_r e^{-\frac{i}{\hbar} E_r t}, \quad (88)$$

ahol az állapot nem triviális időfüggését a kifejtési együtthatókra hárítottuk át. A megoldást a

$$\Psi_i(0) = \varphi_i$$

kezdeti feltétellel rögzítjük, ami a kifejtési együtthatókra a

$$c_{ri}(0) = \delta_{ri}, \quad r = 1, 2, \dots$$

feltételt szolgáltatja.

A (88) alatti ansatz-ot behelyettesítve az állapotegyenletbe, nyerjük:

$$\sum_r i\hbar \left(\frac{\partial c_{ri}(t)}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} E_r c_{ri}(t) \right) \varphi_r e^{-\frac{i}{\hbar} E_r t} = \sum_r c_{ri}(t) (E_r + V(t)) \varphi_r e^{-\frac{i}{\hbar} E_r t}.$$

Egyszerűsítve, valamint mindkét oldalt balról $\varphi_k^* \exp(iE_k t/\hbar)$ stacionárius állapotfüggvénnyel beszorozva és a térkoordinátákra kiintegrálva kapjuk a következő összefüggést:

$$\sum_r i\hbar \frac{\partial c_{ri}}{\partial t} \delta_{kr} e^{\frac{i}{\hbar} (E_k - E_r) t} = \sum_r c_{ri} \langle \varphi_k | V \varphi_r \rangle e^{\frac{i}{\hbar} (E_k - E_r) t}.$$

Bevezetve a $V_{kr} = \langle \varphi_k | V \varphi_r \rangle$ és $\omega_{kr} = (E_k - E_r)/\hbar$ jelöléseket és elvégezve a baloldali összegzést, kapjuk a kifejtési együtthatókat meghatározó

$$\frac{dc_{ki}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_r V_{kr}(t) c_{ri} e^{i\omega_{kr} t} \quad (89)$$

egyenletrendszert, amely ekvivalens az állapotegyenlettel. Az időfüggő perturbációs számítás alapját képező (89) alatti egyenletet integrálás után szukszcesszív approximációval oldhatjuk meg abban az esetben, ha a perturbáló $V(t)$ potenciál gyenge (azaz a $V_{kr}(t)$ matrix-elemek kicsik):

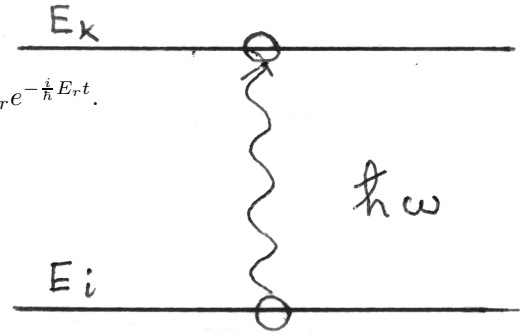
$$c_{ki}^{(n+1)}(t) = c_{ki}^{(n)}(0) + \frac{1}{i\hbar} \sum_r \int_0^t V_{kr}(\tau) e^{i\omega_{kr}\tau} c_{ri}^{(n)}(\tau) d\tau. \quad (90)$$

Amennyiben a $V(t)$ perturbáció gyenge (azaz $V_{kr}t/\hbar \ll 1$), a rendszer egy ideig a kiinduló állapot közelében marad. Ezért nulladik közelítésben az átmeneti valószínűséget megadó kifejtési együtthatót a következőképpen vehetjük fel:

$$c_{ri}^{(0)}(t) = \delta_{ri}.$$

Ezt behelyettesítve a (90)-ik egyenlet jobb oldalába, az átmeneti amplitúdóra első rendben a következő kifejezést kapjuk:

$$c_{ki}^{(1)}(t) = \delta_{ki} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_{ki}(\tau) e^{i\omega_{ki}\tau} d\tau.$$



ábra. Fény által történő gerjesztés szemléltetése.

Tehát annak valószínűsége (első rendben), hogy a $t = 0$ időpillanatban E_i energiával rendelkező állapotban levő rendszer t ideig tartó $V(t)$ perturbáció hatására átkerül az E_k energiájú állapotba, a következő ($i \neq k$):

$$W^{(1)}(i \rightarrow k) = |c_{ki}^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t V_{ki}(\tau) e^{i\omega_{ki}\tau} d\tau \right|^2. \quad (91)$$

Amennyiben $V_{ki} = 0$, az átmenet *elsőrendben tiltott*. Ilyenkor az átmenet valószínűségéről a másodrendű amplitúdó ad felvilágosítást:

$$c_{ki}^{(2)}(t) = \delta_{ki} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_{ki}(\tau) e^{i\omega_{ki}\tau} d\tau + \frac{1}{(i\hbar)^2} \sum_r \int_0^t \int_0^\tau V_{kr}(\tau) V_{ri}(\tau') e^{i[\omega_{kr}\tau + \omega_{ri}\tau']} d\tau' d\tau,$$

amely első és második tagja $i \neq k$ esetén zérus, a harmadik tag pedig igen kicsi a kölcsönhatási matrixelem négyzetének megjelenése miatt.

7.2. INDUKÁLT ABSZORPCIÓ ÉS EMISSZIÓ.

Alkalmazási példaként kiszámítjuk a fény által okozott (indukált) abszorpció és emisszió valószínűségét az $(i \rightarrow k)$ átmenet esetén, első rendben. Az elektron-fény kölcsönhatás révén az elektron x -irányú elmozdulásakor $V(x, t) = e\mathcal{E}_{0x}x \sin \omega t$ (perturbációs) potenciális energiára tesz szert. (Hasonló megfontolások tehetők az y - és z -irányú elmozdulások esetén.) Ezt beírva a (91) egyenletbe, kapjuk

$$\begin{aligned} W_x^{(1)}(i \rightarrow k) &= \frac{e^2 \mathcal{E}_{0x}^2}{\hbar^2} |x_{ki}|^2 \left| \int_0^t \sin \omega \tau e^{i\omega_{ki}\tau} d\tau \right|^2 \\ &= \frac{e^2 \mathcal{E}_{0x}^2}{\hbar^2} |x_{ki}|^2 \left| \int_0^t \frac{1}{2i} (e^{i\omega\tau} - e^{-i\omega\tau}) e^{i\omega_{ki}\tau} d\tau \right|^2 \\ &= \frac{e^2 \mathcal{E}_{0x}^2}{\hbar^2} |x_{ki}|^2 \left| \frac{1}{2(\omega + \omega_{ki})} (e^{i(\omega + \omega_{ki})t} - 1) - \frac{1}{2(\omega_{ki} - \omega)} (e^{i(\omega_{ki} - \omega)t} - 1) \right|^2. \end{aligned} \quad (92)$$

Az indukált emisszió és abszorpció valószínűsége tehát függ az $x_{ki} = \langle \varphi_k | x \varphi_i \rangle = \int d\mathbf{r} \varphi_k^*(\mathbf{r}) x \varphi_i(\mathbf{r})$ matrixelemtől. Minthogy az elektron y és z irányban is mozoghat, átmenet az $i \rightarrow k$ állapotok között csak akkor jöhet létre, ha valamelyik az x_{ik} , y_{ik} , z_{ik} koordináta átmeneti matrixelemek közül nem zérus. Ez *kiválasztási szabályok* megállapítását teszi lehetővé, amellyel később foglalkozunk.

Könnyen belátható, hogy a (92) alatti átmeneti valószínűség időtől függő része akkor vesz fel nagy értéket, ha a nevezők zérushoz közelítenek. Ebből a tényből kapjuk a Bohr által heurisztikusan bevezetett *frekvencia feltételeket*,

$$\omega_{ki} - \omega \approx 0 \quad \rightarrow \quad E_i + \hbar\omega \approx E_k$$

a fény *abszorpció*, és

$$\omega_{ki} + \omega \approx 0 \quad \rightarrow \quad E_i \approx E_k + \hbar\omega$$

az *indukált fény emisszió* jelenségére.

7.2.1. KIVÁLASZTÁSI SZABÁLYOK.

Mint az imént említettük, első rendben megengedett átmeneteket az jellemez, hogy legalább az egyik alábbi egyenlőtlenség teljesül:

$$x_{ki} \neq 0, \quad y_{ki} \neq 0, \quad z_{ki} \neq 0.$$

Először a harmonikus oszcillátor, majd a hidrogénatom esetét vizsgáljuk.

a) *A harmonikus oszcillátor kiválasztási szabályai.*

Elegendő csak az x koordináta matrixelemét vizsgálni:

$$x_{n'n} = \langle \varphi_{n'} | x | \varphi_n \rangle \neq 0,$$

ahol

$$\varphi_n = c_n e^{-\xi^2/2} u_n(\xi)$$

a harmonikus oszcillátor sajátfüggvényeit jelenti a korábban (ld. 3. fejezet) bevezetett jelölésekkel:

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad \omega = \sqrt{\frac{D}{m}}, \quad c_n = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{(1/4)} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}.$$

Az $u_n \equiv H_n$ Hermite-polinomra (a Schrödinger egyenlet megoldás során) megismertünk egy rekurziós összefüggést,

$$u_n''(\xi) - 2\xi u_n'(\xi) + 2n u_n(\xi) = 0.$$

Célszerű ezt átírni a következő formába:

$$u_{n+1} = 2\xi u_n - 2n u_{n-1},$$

amelyből az első két tag, $u_0 = 1$ és $u_1 = 2\xi$, ismeretében az összes Hermite-polinom leszámaztatható.

Ezen előkészítés után a matrixelemet könnyű kiszámolni:

$$x_{n'n} = \frac{c_{n'} c_n}{m\omega/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} u_{n'}(\xi) \xi u_n(\xi) e^{-\xi^2} d\xi =$$

$$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{c_n}{c_{n+1}} \langle \varphi_{n'} | \varphi_{n+1} \rangle + n \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{c_n}{c_{n-1}} \langle \varphi_{n'} | \varphi_{n-1} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left[\sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{n',n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{n',n-1} \right].$$

A harmonikus oszcillátorra vonatkozó kiválasztási szabály, mivel az $y_{n'n}$ és $z_{n'n}$ matrixelemekre is ugyanez az eredmény adódik,

$$n \rightarrow n \pm 1. \quad (93)$$

A harmonikus oszcillátor abszorpciós és emissziós színe tehát *egyetlen* vonalat tartalmaz olyan ν frekvencián, amely pontosan megegyezik az oszcillátor klasszikus $\nu_0 = \omega/2\pi = \sqrt{D/m}/2\pi$ frekvenciájával:

$$\nu = \frac{E_{n+1} - E_n}{h} = \frac{E_n - E_{n-1}}{h} = \frac{\omega}{2\pi} = \nu_0.$$

A valóságban az ideális harmonikus oszcillátor eset csak közelítőleg valósul meg, ezért az oszcillátor (vibrációs) színek mindig tartalmaz ν_0 mellett halványabb vonalakat is (anharmonikus oszcillátor).

b) *A hidrogénatom kiválasztási szabályai.*

Az x, y, z operátorok átmeneti matrixelemeit most a

$$\varphi_{n\ell m} = \frac{1}{r} R_{n\ell}(r) Y_{\ell}^m(\vartheta, \phi)$$

hidrogénatom sajátfüggvények segítségével kell kiszámolni. Az $x = r \sin \vartheta \cos \phi$ irányú átmenet esetén például:

$$x_{n'\ell'm', n\ell m} = \langle \varphi_{n'\ell'm'} | x | \varphi_{n\ell m} \rangle =$$

$$\int_0^{\infty} dr r R_{n'\ell'}(r) R_{n\ell}(r) \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin \vartheta d\vartheta \sin \vartheta \cos \phi Y_{\ell'}^{m'*}(\vartheta, \phi) Y_{\ell}^m(\vartheta, \phi),$$

és hasonlóan a többi, az $y = r \sin \vartheta \sin \phi$, illetve az $z = r \cos \vartheta$ operátor átmeneti matrixelemeire vonatkozóan.

Mármost legkönnyebben a ϕ -szerinti integrálás végezhető el, mivel a ϕ változó egyedül az Y_{ℓ}^m gömbfüggvény exponensében fordul elő. Ezért a ϕ -szerinti integrálás az egyes matrixelemekhez a következő, m -re vonatkozó kiválasztási szabályokat rendeli:

$$x_{n'\ell'm', n\ell m} \sim \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\phi} \cos \phi d\phi \neq 0, \quad \text{ha } m' = m \pm 1, \quad \text{szabálya.} \quad (94a)$$

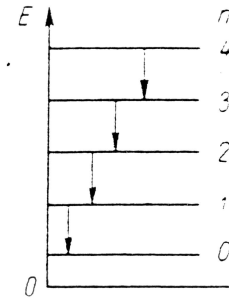
$$y_{n'\ell'm', n\ell m} \sim \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\phi} \sin \phi d\phi \neq 0, \quad \text{ha } m' = m \pm 1, \quad (94b)$$

$$z_{n'\ell'm', n\ell m} \sim \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\phi} d\phi \neq 0, \quad \text{ha } m' = m. \quad (94b)$$

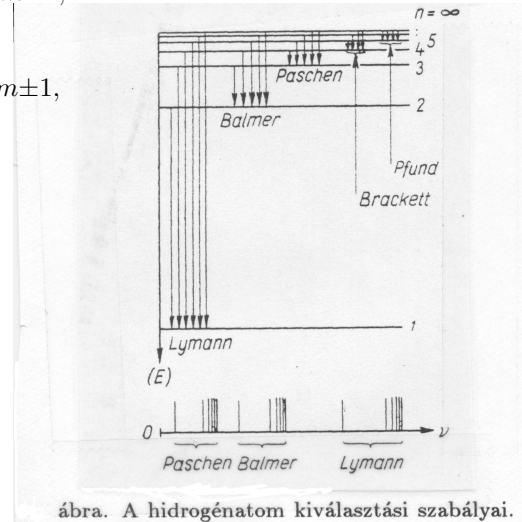
A ϑ -szerinti integrálás eredménye a mellékkvantumszámok közötti kiválasztási szabályhoz ad járulékot:

$$l \rightarrow l \pm 1, \quad (95)$$

amely kiszámításához fel kell használni a gömbfüggvények explicit alakját. Megjegyzendő, hogy ezen kiválasztási szabály elfogadása vezetett korábban a rotációs spektrum "null-vonal hiány" jelenségének megértéséhez, amely direkt kísérleti bizonyítékát szolgáltatva az $|L|^2 = \hbar^2 \ell(\ell + 1)$ képlet helyességének a Bohr féle $|L|^2 = \hbar^2 \ell^2$ posztulátummal szemben. A fenti kiválasztási szabály tehát önmagában a *rotációs spektrum kiválasztási szabályát* is jelenti egyúttal.



ábra. A harmonikus oszcillátor kiválasztási



ábra. A hidrogénatom kiválasztási szabályai.

Végül könnyen belátható az is, hogy az r -szerinti integrálás a főkvantumszámok változásában semmiféle korlátozáshoz nem vezet, azaz tetszőleges

$$n' \rightarrow n = 0, 1, \dots \quad (96)$$

átmenet lehetséges a főkvantumszámokat tekintve.

7.3. ÁTMENETI VALÓSZÍNŰSÉG IDŐBEN ÁLLANDÓ PERTURBÁCIÓ ESETÉN. FERMI ARANYSZABÁLYA.

Az eddigiekben a periódikus potenciálok esetét tárgyaltuk. Láttuk, hogy egy $V(t) \approx \sin \omega t$ potenciál (a fény elektromos potenciálja) által okozott indukált abszorpció és emisszió jelenségét miként érthetjük meg az elsőrendű perturbációs számítás segítségével.

Most az elsőrendű, időfüggő perturbációs számítás egy másik alkalmazásával fogunk foglalkozni, nevezetesen avval az esettel, amikor a potenciál (időben) *állandó* egy bizonyos $t_0 = 0$ időpillanattól kezdve. Ilyen esettel találkozunk például az elektron-atommag szóródásnál, vagy a radioaktív bomlásoknál, pl. egy alfa-részecske atommagból való kilökődése esetén. Ilyenkor az esemény bekövetkezte előtt egy (időben) állandó potenciálú állapot uralkodik, majd az esemény lezajlása után, az állapotváltozás miatt, egy másik, (időben) állandó potenciálú állapotba kerül a végállapotú rendszer. A spontán emisszió is egy ilyen, egy időpontban bekapcsolt, időfüggetlen potenciál esetével tárgyalható.

Tekintsük az elsőrendű időfüggő perturbációs számítás valószínűségi alapképletét:

$$W^{(1)}(i \rightarrow k) = |c_{ki}^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t V_{ki}(\tau) e^{i\omega_{ki}\tau} d\tau \right|^2,$$

ahol $\omega_{ki} = (E_k - E_i)/\hbar$ ($i \neq k$) a kezdeti és végállapot energiák közti különbséggel kapcsolatos.

Amennyiben $V(t)$ -t egy lépcsőfüggvénnyel írhatjuk le,

$$V(t) = \tilde{V} \Theta(t), \quad \Theta(t) = \begin{cases} 0, & \text{ha } t < 0 \\ 1, & \text{ha } t \geq 0 \end{cases},$$

ahol $\tilde{V} = \tilde{V}(\mathbf{r})$, azaz a potenciál csak időben állandó, de helyel még változhat, akkor az átmeneti valószínűsége első rendben a következő összefüggést kapjuk:

$$\begin{aligned} W_{(i \rightarrow k)}^{(1)}(t) &= \frac{1}{\hbar^2} |V_{ki}|^2 \left| \frac{e^{i\omega_{ki}t} - 1}{i\omega_{ki}} \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |V_{ki}|^2 \frac{\sin^2(\omega_{ki}/2)t}{(\omega_{ki}/2)^2} \frac{\pi}{\pi t} \\ &= \frac{\pi t}{\hbar^2} |V_{ki}|^2 f_t(\omega_{ki}/2), \end{aligned}$$

ahol bevezettük a következő jelöléseket:

$$V_{ki} \equiv \langle \varphi_k | \tilde{V}(r) | \varphi_i \rangle, \quad f_t(\alpha) = \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha^2 t},$$

és

$$\alpha = \omega_{ki}/2.$$

Mármost könnyen bizonyítható, hogy

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f_t(\alpha) = \delta(\alpha),$$

azaz

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha f_t(\alpha) F(\alpha) = F(0).$$

$t \rightarrow \infty$ esetén tehát (azaz, ha a hatás ∞ ideig tart) az időegységre eső átmeneti valószínűség

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{W_{(i \rightarrow k)}^{(1)}(t)}{t} = \frac{\pi}{\hbar^2} |V_{ki}|^2 \delta(\omega_{ki}/2) = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ki}|^2 \delta(E_k - E_i) \equiv \Gamma_{ki}(\alpha) = \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha^2 t}$$

(a δ -függvény megjelenése az energiamegmaradást fejezi ki.)

Az $f_t(\omega_{ki}/2)$ függvény vizsgálatából felvilágosítást kaphatunk arról, hogy egy *véges* ideig tartó kölcsönhatás mekkora változást okozhat a rendszer energiájában. Tartson a perturbáció $t \approx \delta t$ ideig. A 45. ábrából leolvashatjuk, hogy az f_t függvény $\omega_{ki}/2 \approx 0$ helyen veszi fel legnagyobb értékét, ezért $\omega_{ik} \approx 0$, azaz első rendben, véges ideig tartó állandó perturbáció hatására csak közelítőleg őrződik az energia: $E_i \approx E_k$. Az energia megváltozása $\delta\omega_{ki}/2 \sim \pi/t = \pi/\delta t$ lehet, ami az átmeneti valószínűségfüggvény maximuma és első minimuma (zérushelye) közti távolság. Azaz $\delta\omega_{ki} \sim 2\pi/\delta t$, ami azt mutatja, hogy az E_i kezdeti energiától nem valószínű nagyobb eltérés, mint

$$\delta E \sim \frac{2\pi\hbar}{\delta t},$$

amely összhangban van a Heisenberg-féle határozatlansági reláció

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{2\Delta t}$$

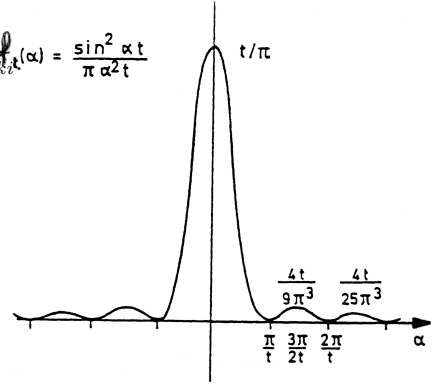
képletével.

Ha nem egy élesen meghatározott "k" végállapot érdekel bennünket, hanem egy "k" körüli tartomány, akkor a valószínűségeket össze kell adnunk (folytonos állapoteloszlás esetén pedig integrálnunk):

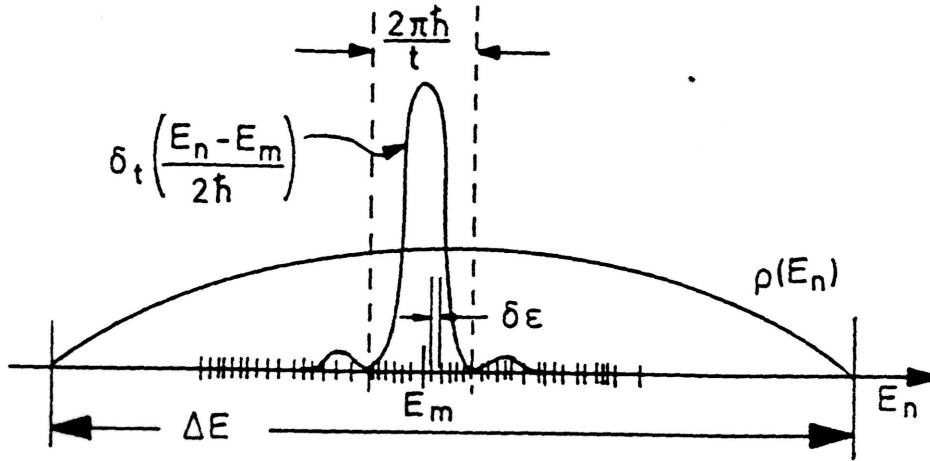
$$P_{i \rightarrow \Sigma k} = \sum_k \Gamma_{ki} = \int dE_k \rho(E_k) \Gamma_{ki} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ki}|^2 \int dE_k \delta(E_k - E_i) \rho(E_k),$$

ami kiintegrálás után adja Fermi aranyszabályát:

$$P_{i \rightarrow \Sigma k} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ki}|^2 \rho(E_i). \quad (98)$$



ábra. Az $f_t(\omega_{ki}/2)$ függvény viselkedése.



Fermi arany szabálya folytonos eloszlás esetén.

7.4. TÖLTÖTT RÉSZECSCHE HAMILTON OPERÁTORA ELEKTROMÁGNESES TÉR JELENLÉTE ESETÉN

Megalkotjuk az energia operátort $\vec{\mathcal{E}}$ elektromos és $\mathbf{B}$ mágneses tér esetén, amelyek a $\Phi(\mathbf{r}, t)$ skalár és $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ vektor potenciálból az ismert módon származtathatók le:

$$\vec{\mathcal{E}} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \vec{\nabla} \Phi, \quad \mathbf{B} = \vec{\nabla} \times \mathbf{A}.$$

Egy $q = \pm e$ töltésű és m tömegű részecske mozgásegyenlete elektromágneses térben

$$m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F} = q(\vec{\mathcal{E}} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}),$$

amely az elektrodinamikából ismeretes

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2 + q\Phi(\mathbf{r}, t)$$

Hamilton függvényből származtatható le. Ebből akkor kapunk Hamilton *operátort*, ha $\mathbf{p}$ -t és $\mathbf{r}$ -t a megfelelő operátorokkal helyettesítjük:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + q\Phi(\mathbf{r}, t). \quad (99)$$

Az első tag, azaz a kinetikus energiaoperátor kiértékelésénél a négyzetre emeléskor előfordul a következő két tag,

$$\vec{\nabla} \mathbf{A} + \mathbf{A} \vec{\nabla} = (\vec{\nabla} \mathbf{A}) + 2\mathbf{A} \vec{\nabla} = 2\mathbf{A} \vec{\nabla} \equiv 2(\mathbf{A}, \vec{\nabla}),$$

amelynek továbbalakításakor kihasználtuk, hogy *Coulomb mértékben* fogunk dolgozni a továbbiakban: $(\vec{\nabla} \cdot \mathbf{A}) = 0$.

Így a részecske mozgását a következő Schrödinger egyenlet fogja leírni:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + \frac{i\hbar q}{m} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\mathbf{r}, t) + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) + q\Phi(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (100)$$

7.4.1. ÁLLANDÓ MÁGNESES TÉR ESETE.

Vizsgáljuk most meg a részecske mozgását térben és időben állandó,

$$\mathbf{B} \neq \mathbf{B}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{B} = \text{áll.}$$

mágneses tér esetén. Mindenek előtt bizonyítjuk, hogy a

$$\mathbf{B} = \vec{\nabla} \times \mathbf{A} = \text{áll.}$$

összefüggés kielégül, ha a vektorpotenciál előállítható az

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}$$

formában.

Bizonyítás:

$$\begin{aligned} B_i &= (\vec{\nabla} \times \mathbf{A})_i = \frac{1}{2} (\vec{\nabla} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{r}))_i = \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \partial_j (\mathbf{B} \times \mathbf{r})_k = \\ &= \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \partial_j \epsilon_{kst} B_s r_t = \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \epsilon_{kst} B_s \delta_{jt} = \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \epsilon_{ksj} B_s = \\ &= \frac{1}{2} (1 \cdot 1 \cdot B_i + (-1)(-1)B_i) = B_i, \quad (QED). \end{aligned}$$

(A fenti bizonyításnál az Einstein konvenciót használtuk: összegzés volt értendő minden kétszer előforduló indexre; az utolsó átalakításnál az s, j és k -ra vonatkozó összegzést végeztük el, amelynél s nyilván csak i lehet, míg j felveheti k értékét, de ekkor k kötelezően j kell legyen az

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & i, j, k = \text{ciklikusanpáros}, \\ -1 & i, j, k = \text{ciklikusanpáratlan}, \\ 0 & \text{egyébként}. \end{cases}$$

antiszimmetrikus tenzor definíciós tulajdonsága miatt.)

A (100) alatti Schrödinger egyenlet jobboldalának második tagjában szereplő operátort ezért állandó $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$ mágneses tér esetén a következőképpen írhatjuk ($q = -e$):

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar q}{m} (\mathbf{A}, \vec{\nabla}) &= \frac{1}{2} \frac{i\hbar q}{m} (\mathbf{B} \times \mathbf{r}, \vec{\nabla}) = \frac{1}{2} \frac{i\hbar q}{m} (\mathbf{r} \times \vec{\nabla}, \mathbf{B}) = \frac{-q}{2m} (\mathbf{L}, \mathbf{B}) \\ &= -\frac{q}{2m} (L_z B_z) = +\frac{e\hbar}{2m} \frac{1}{\hbar} (L_z B_z) = +\mu_B \frac{1}{\hbar} (L_z B_z) = -(\mathbf{M}^L, \mathbf{B}) = V_{\text{magn}}^L. \end{aligned}$$

Tehát ez a második tag (a Zeeman effektusnál már korábban mesterségesen bevezetett, a Schrödinger energiaoperátorhoz egyszerűen hozzáírt) *mágneses potenciális energiáról* ad számot. Pauli-féle *paramágneses* tagnak hívjuk a továbbiakban.

A harmadik tag operátorának kiértékeléséhez a következő átalakításokat végezzük el:

$$\frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2 = \frac{q^2}{8m} (\mathbf{r} \times \mathbf{B})^2 = \frac{q^2}{8m} (\mathbf{r}^2 \mathbf{B}^2 - (\mathbf{r}, \mathbf{B})^2) = \frac{q^2 B_z^2}{8m} (x^2 + y^2).$$

Ezt a harmadik tagot Landau-féle *diamágneses* tagnak hívjuk.

A továbbiakban belátjuk, hogy a diamágneses tag elhanyagolható a paramágneses tag jelenléte esetén ($q = -e$):

$$\begin{aligned}\frac{dia}{para} &= \frac{|\langle 3.tag \rangle|}{|\langle 2.tag \rangle|} = \frac{\frac{e^2}{8m} \langle x^2 + y^2 \rangle B_z^2}{\frac{e}{2m} \langle L_z \rangle B_z} = \\ \frac{e}{4} \frac{\langle x^2 + y^2 \rangle}{\langle L_z \rangle} B_z &= \frac{ea_0^2}{4\hbar} B_z = 1.1 \times 10^{-6} B_z / Tesla \\ &= \frac{1}{4} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{cB_z}{e/a_0^2} = \frac{1}{137} \cdot \frac{mágneses\ tér}{elektromos\ tér}\end{aligned}$$

Mármint, mivel földi körülmények között még laboratóriumban is $B_z \leq 10^5 G = 10 Tesla$, ezért az A^2 -es 3. tag elhagyható abban az esetben, ha a 2. tag nem zérus ($\langle L_z \rangle \neq 0$). A diamágnességet leíró 3. tag pl. csak egyes fémekben és szabad elektrongáz esetén, vagy a neutron csillagok felületén válik összemérhetővé a paramágnességet leíró 2. taggal.

Vizsgáljuk most meg a paramágneses (2.) tag viszonyát az utolsó, az elektromos potenciál taghoz képest ($q = -e$).

$$\begin{aligned}\frac{param.}{elektromos} &= \frac{(-q/2m) \langle L_z \rangle B_z}{\langle q\Phi \rangle} \approx \frac{(e/2m) \hbar B_z}{e^2/a_0} = \frac{a_0 \hbar}{2me} B_z = \\ &= \frac{a_0^2 \hbar}{2me a_0} B_z = \frac{a_0^2 \hbar}{2me} \frac{me^2}{\hbar^2} \frac{\hbar c}{e^2} \alpha B_z = \frac{a_0^2 \alpha}{2e} c B_z = 2 \times 10^{-6} B_z (Tesla),\end{aligned}$$

ami azt jelenti, hogy laboratóriumi mágneses térerősségek mellett a nívók energiája csak kicsit változik.

7.4.2. A HIDROGÉNATOM ENERGIANÍVÓINAK ELTOLÓDÁSA HOMOGEN ÁLLANDÓ MÁGNESES TÉR HATÁSÁRA.

Csak a 2. tagot megtartva a (100) alatti Schrödinger egyenlet szeparálás után a következő alakú lesz

$$H\psi_{nlm_l} = \left(H_0 - \frac{q}{2m_e} B_z L_z \right) \psi_{nlm_l} = E_{nlm_l} \psi_{nlm_l},$$

ahol

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - k \frac{e^2}{r},$$

s így az energiasajátérték:

$$E_{nlm_l} = \frac{E_1}{n^2} - \frac{q\hbar}{2m_e} B_z m_l = \frac{E_1}{n^2} + \hbar \omega_L m_l,$$

ahol bevezettük az

$$\omega_l = -\frac{q\hbar}{2m_e} B_z = \frac{e\hbar}{2m_e} B_z$$

mennyiséget a Larmour körfrekvencia jelölésére. Az m_l kvantumszám megjelenése miatt minden l mellékkvantumszámú állapot $(2l + 1)$ -szeresen felhasad (47. ábra). A felhasadás mértéke független az l -től, viszont arányos a B_z mágneses térerősséggel, s az arányossági tényező éppen egy Bohr magneton: $\mu_B = e\hbar/2m_e$. B_z -t Tesla-ban mérve $\omega_L = \frac{e\hbar}{2m_e}B_z = 13.6 \text{ eV } (4 \times 10^{-14} B_z [\text{T}])$. A jelenséget *közönséges Zeemann-effektus*nak hívjuk és korábban a spin tárgyalásakor találkoztunk vele (4. fejezet).

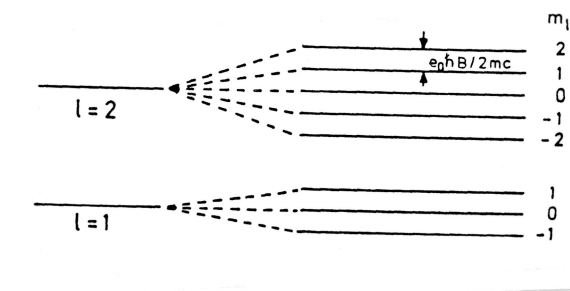
További megjegyzések. A (100) alatti Schrödinger egyenlet energiaoperátora állandó $\mathbf{B}$ esetén a következő alakú:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{q}{2m_e}(\mathbf{L}, \mathbf{B}) + \frac{q^2 B_z^2}{8m_e}(x^2 + y^2) + q\Phi(\mathbf{r}, t), \quad (101)$$

ahol a 2. tag a paramágneses, a 3. tag a diamágneses energiához ad járulékot. A mágneses momentum az a vektormennyiség, amely az energiaoperátor $\mathbf{B}$ szerinti parciális deriváltjaként áll elő,

$$\vec{\mu} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{B}}.$$

47. Ábra. A közönséges Zeemann effektus szemléltetése.



Így a paramágneses 2. tag járuléka állandó mágneses tér esetén a

$$\vec{\mu} \equiv -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{B}} = \frac{q}{2m_e}\mathbf{L} = -\mu_B \frac{1}{\hbar}\mathbf{L}$$

operátor várható értéke:

$$\langle \vec{\mu} \rangle = -\mu_B \langle L \rangle / \hbar,$$

ahol a Bohr magneton $\mu_B = e\hbar/2m_e = 9.27 \times 10^{-24} \text{ J/T}$. (A spint most elhanyagoljuk.) Ha ez a tag zérus (gömbszimmetrikus állapotok esete), akkor vehető észre a diamágneses energiát jelentő 3. tag, amely átlagosan

$$\langle \vec{\mu} \rangle = -\frac{q^2 \mathbf{B}}{4m_e} \langle x^2 + y^2 \rangle \approx -\frac{q^2 \mathbf{B}}{6m_e} a_0^2$$

mágneses momentumot képvisel, amely az indukáló $\mathbf{B}$ mágneses térrel arányos (és azzal ellentétes irányú).

7.5. KINETIKUS ÉS KANONIKUS IMPULZUS FELCSERÉLÉSI RELÁCIÓI

A továbbiakban *kanonikus* impulzusnak nevezzük az eddig megismert $\mathbf{p}$ impulzus operátort, amely a koordináta operátorral a jól ismert felcserélési relációkat elégíti ki:

$$[p_i, x_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}, \quad \text{miközben } [x_i, x_j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0.$$

Tehát a kanonikus impulzus komponensei egymással felcserélhetők, azok egyidejűleg elvben mérhetők.

Kinetikus impulzusnak nevezzük a továbbiakban a

$$\mathbf{K} = \mathbf{p} - q\mathbf{A}$$

mennyiséget. Vektorpotenciál nélküli térrészben tehát a kinetikus impulzus megegyezik a kanonikus impulzussal.

A kinetikus impulzus felcserélési szabályai a következők:

$$[K_i, x_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \quad \text{és} \quad [K_i, K_j] = -\frac{\hbar}{i} q \varepsilon_{ijk} B_k.$$

Tehát a kinetikus impulzus komponensei mágneses tér jelenléte esetén nem cserélhetők fel egymással. Ennek messzeható következményei lesznek (ld. Landau-nívók).

7.6. A HULLÁMFÜGGVÉNY VÁLTOZÁSA MÉRTÉKTRANSZFORMÁCIÓ HATÁSÁRA

Az elektromágneses térben mozgó q töltésű, m tömegű részecskére ható (Lorentz) erő,

$$m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F} = q(\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B} + \vec{\mathcal{E}}),$$

$\mathbf{B}$ -től és $\vec{\mathcal{E}}$ -től függ, a Schrödinger egyenlet viszont a mértéktranszformáció erejéig meghatározott $\mathbf{A}$ vektorpotenciáltól és Φ skalárpotenciáltól. Minthogy ezek a klasszikus elektrodinamikában csak segédmennyiségként szerepelnek, felmerül a kérdés, vajon maga a hullámfüggvény, $\Psi(\mathbf{r}, t)$, függ-e a mértéktranszformációktól? Továbbá: vajon a töltött részecskék mozgása csupán csak $\mathbf{B}$ -re és $\vec{\mathcal{E}}$ -re, vagy $\mathbf{A}$ -ra és Φ -re is érzékeny-e?

Mint ismeretes, az

$$\vec{\mathcal{E}} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \vec{\nabla} \Phi, \quad \mathbf{B} = \vec{\nabla} \times \mathbf{A}$$

Maxwell egyenleteket invariánsan hagyó

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \vec{\nabla}\Lambda(\mathbf{r}, t), \quad \Phi \rightarrow \Phi' = \Phi - \frac{\partial}{\partial t}\Lambda(\mathbf{r}, t)$$

potenciál-transzformációkat *mértéktanszformációnak* nevezzük, ahol $\Lambda(\mathbf{r}, t)$ egy tetszőleges skálár függvényt jelöl.

Megmutatjuk, hogy a baloldali (vesszőtlen) potenciálokhoz tartozó

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + q\Phi(\mathbf{r}, t) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (102)$$

Schrödinger egyenlet $\Psi(\mathbf{r}, t)$ megoldása és a jobboldali (vesszős, mérték-transzformált) potenciálokhoz tartozó

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) \right)^2 + q\Phi'(\mathbf{r}, t) \right] \Psi'(\mathbf{r}, t) \quad (102')$$

Schrödinger egyenlet $\Psi'(\mathbf{r}, t)$ megoldása közötti összefüggés a következő:

$$\Psi'(\mathbf{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda(\mathbf{r}, t)} \Psi(\mathbf{r}, t).$$

Bizonyítás: Felhasználjuk a következő azonosságot, amely egy tetszőleges $f(\mathbf{r}, t)$ differenciálható függvényre vonatkozik:

$$e^{f(\mathbf{r}, t)} \vec{\nabla} = (\vec{\nabla} - (\vec{\nabla} f)) e^{f(\mathbf{r}, t)}$$

és

$$e^{f(\mathbf{r}, t)} \frac{\partial}{\partial t} = \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial f}{\partial t} \right) e^{f(\mathbf{r}, t)} = e^f \frac{\partial f}{\partial t} + e^f \frac{\partial}{\partial t} - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) e^f,$$

és beszorozzuk a (102) alatti Schrödinger egyenletet balról $e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda(\mathbf{r}, t)}$ -vel:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{2m} e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda(\mathbf{r}, t)} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right) \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right) + e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda(\mathbf{r}, t)} q\Phi(\mathbf{r}, t) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \\ &= i\hbar e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda(\mathbf{r}, t)} \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \end{aligned}$$

ami, felhasználva az előbbi azonosságot, a következőképpen írható tovább:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \frac{\hbar}{i} \frac{i}{\hbar} q(\vec{\nabla} \Lambda) \right)^2 + q\Phi(\mathbf{r}, t) \right] e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda(\mathbf{r}, t)} \Psi(\mathbf{r}, t) \\ &= i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} q \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \right) e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda(\mathbf{r}, t)} \Psi(\mathbf{r}, t), \end{aligned}$$

azaz

$$\left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - q\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) \right)^2 + q\Phi'(\mathbf{r}, t) \right] \Psi'(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi'(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$$

Q.E.D

7.7. AHARONOV-BOHM (AB) EFFEKTUS (1959)

Tekintsük az elektron ($q = -e$) mozgását egy időben állandó mágneses tér [$\mathbf{B} \neq \mathbf{B}(t)$] jelenléte esetén.

Elképzelhető olyan térrész, amelyben $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \equiv \text{rot} \mathbf{A} = 0$. Egy ilyen térrészben vettük fel a 48. ábra G görbáját. Ebben a térrészben $\mathbf{B} \equiv 0$, amiből $\mathbf{A} = \vec{\nabla} \Lambda(\mathbf{r})$ következik, ebből pedig $\Lambda(\mathbf{r}) = \int_{r_0}^r ds \mathbf{A}(\mathbf{s})$. Azaz $\Lambda \neq \Lambda(t)$, $\Phi' = \Phi$.

Abban a térrészben, ahol $\mathbf{B} \equiv 0$, maga az $\mathbf{A}$ vektorpotenciál nem szükségképpen zérus, s így a hullámfüggvényt vagy a ($V = q\Phi$)

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - q\mathbf{A} \right)^2 \Psi + V\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi \quad (103)$$

$\mathbf{A} \neq 0$ esetre vonatkozó Schrödinger egyenletből, vagy a mértéktranszformált s így vektorpotenciál nélküli Schrödinger egyenletből ($V = q\Phi' = q\Phi$)

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right)^2 \Psi' + V\Psi' = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi' \quad (103')$$

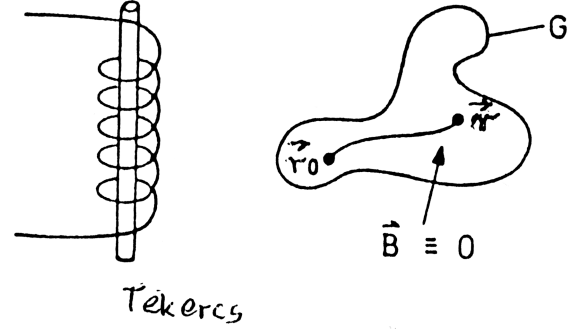
kaphatjuk meg, ahol $\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla(-\Lambda) = 0$. Ez utóbbi egyenlet nyilván akkor is érvényes, amikor $\mathbf{B} \equiv 0$ mindenütt, ezért a (103') egyenletből nyert Ψ' -t a mágneses tér nélküli hullámfüggvénynek fogjuk hívni és Ψ_0 -al jelöljük. Ugyanakkor a (103)-as egyenletből adódó Ψ -t a $\mathbf{B} \neq 0$ mindenütt miatt Ψ_B -vel fogjuk jelölni. A két hullámfüggvény közti összefüggés az előzőek szerint:

$$\Psi_0 = e^{\frac{i}{\hbar} q(-\Lambda)} \Psi_B,$$

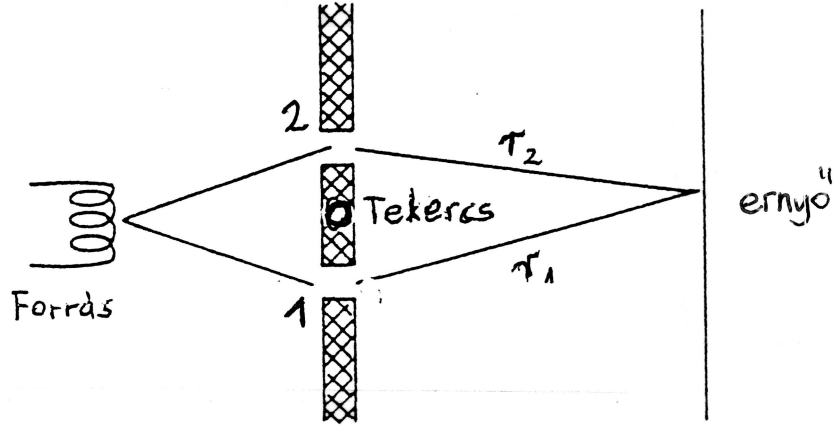
azaz

$$\Psi_B = \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar} q \int_{r_0}^r ds \mathbf{A}(\mathbf{s})}.$$

Annak eldöntésére, hogy az elektron vajon az $\mathbf{A}$ vektorpotenciált, vagy az erőhatással kapcsolatos $\mathbf{B}$ mágneses teret "érzékel-e", Aharonov és Bohm a következő kísérlet elvégzését javasolta (49. ábra).



48. ábra. A G görbe a $B \equiv 0$ térrészben.



49. ábra. Az Aharonov-Bohm interferenciakísérlet szemléltetése felülnézeti metszetben.

Egy elektronforrásból származó koherens elektronsugár-nyalábot két résen vezetnek keresztül. A réseken az elektronok diffraktálódnak, és interferencia képet hoznak létre a felfogóernyő különböző részein (ld. 1. fejezet). A két rés közötti, elektronok számára áthatolhatatlan részen egy szolenoidot helyeznek el, amelyben tetszés szerint tudják változtatni a mágneses teret. Jóllehet az elektronok mindvégig $\mathbf{B} \equiv 0$ (erőmentes) térrészben mozognak, az ernyőn észlelt interferenciakép $\mathbf{B}$ változtatásával változik. A jelenséget a következőképpen értelmezhetjük.

Tegyük fel, hogy a 2. rés zárva van. Ekkor az elektron hullámfüggvénye

$$\Psi_{1B}(\mathbf{r}) = \Psi_{10}(\mathbf{r}) e^{\frac{i}{\hbar} q \int_1 d\mathbf{s} \mathbf{A}(\mathbf{s})},$$

ahol $\Psi_{10}(\mathbf{r})$ jelenti a $\mathbf{B} = 0$ esetén érvényes hullámfüggvényt, az exponensben szereplő vonalintegrál útja pedig az 1. résen áthalad. Amikor az 1. rés van zárva, a hullámfüggvény

$$\Psi_{2B}(\mathbf{r}) = \Psi_{20}(\mathbf{r}) e^{\frac{i}{\hbar} q \int_2 d\mathbf{s} \mathbf{A}(\mathbf{s})},$$

alakban írható. Amennyiben mindkét rés nyitva van, a megoldás az előző két hullámfüggvény szuperpozíciója:

$$\begin{aligned} \Psi_B(\mathbf{r}) &= \Psi_{1B} + \Psi_{2B} = \Psi_{10}(\mathbf{r}) e^{\frac{i}{\hbar} q \int_1 d\mathbf{s} \mathbf{A}(\mathbf{s})} + \Psi_{20}(\mathbf{r}) e^{\frac{i}{\hbar} q \int_2 d\mathbf{s} \mathbf{A}(\mathbf{s})} = \\ &= \left(\Psi_{10}(\mathbf{r}) e^{\frac{i}{\hbar} q [\int_1 d\mathbf{s} \mathbf{A}(\mathbf{s}) - \int_2 d\mathbf{s} \mathbf{A}(\mathbf{s})]} + \Psi_{20}(\mathbf{r}) \right) e^{\frac{i}{\hbar} q \int_2 d\mathbf{s} \mathbf{A}(\mathbf{s})}. \end{aligned}$$

Az exponens szögletes zárójelében álló kifejezés viszont a mágneses fluxus, ugyanis

$$\int_1 d\mathbf{s} \mathbf{A}(\mathbf{s}) - \int_2 d\mathbf{s} \mathbf{A}(\mathbf{s}) = \oint d\mathbf{s} \mathbf{A} = \int d\mathbf{f} (\vec{\nabla} \times \mathbf{A}) = \int d\mathbf{f} \mathbf{B} = \Phi_B.$$

Jóllehet az elektron mindvégig a $\mathbf{B} = 0$, azaz mágneses tér nélküli térben mozog, mégis, a kísérlet szerint, Φ_B változtatása interferenciakép változást okoz. Ezt a jelenséget nevezzük AB effektusnak.

Fizikai magyarázata az, hogy az $\vec{\mathcal{E}}$ és $\mathbf{B}$ lokális hatásán kívül létezik még az $\mathbf{A}$ (és Φ) potenciál(ok)nak is egy kvantummechanikai, nemlokális hatása, ami akkor lép fel, ha $\Phi_B \neq n2\pi\frac{\hbar}{q}$. Úgy is fogalmazhatunk, hogy nem az $\vec{\mathcal{E}}$ és $\mathbf{B}$ klasszikus fizikai mennyiségek az elsődlegesek, hanem az $\mathbf{A}$ és $\Phi(\mathbf{r}, t)$ potenciálok. (Geometriai magyarázata az, hogy az elektron számára megengedett tértartomány nem egyszeresen összefüggő.)

Határozzuk meg az interferencia maximumok és minimumok helyét. Az AB kísérlet elrendezése hengersizmetrikus. Hengersizmetrikus térben a szimetritengelyre merőleges szabad mozgást $\Psi \sim \exp(ikr)/\sqrt{r}$ hullámfüggvény írja le. Számunkra az exponensben álló (ismerős) ikr kifejezés a fontos most. A teljes relatív fázis (a két hullám fáziskülönbsége) az ernyőnél

$$\Psi_B(r_1, r_2 \rightarrow \infty) \sim e^{i(kr_1 + \frac{q}{\hbar}\Phi_B - kr_2)} \times X,$$

ahol X egy $r_1 - r_2$ -től nem függő, egységnyi abszolútértékű fázisfaktort jelöl, és r_i jelenti az i -dik rés és az ernyőn való becsapódás közti távolságot ($r_i = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}|$). Konstruktív interferenciát kapunk, ha a fáziskülönbség $n \times 2\pi$:

$$kr_1 + \frac{q}{\hbar}\Phi_B - kr_2 = 2\pi n, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

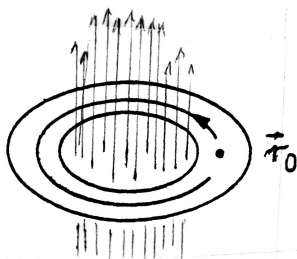
azaz, ha az útkülönbség

$$r_1 - r_2 = \frac{\lambda}{2\pi} \left(2\pi n - \frac{q\Phi_B}{\hbar} \right) = \lambda \left(n + \frac{\Phi_B}{\hbar/e} \right).$$

(Az utolsó átalakításnál a $q = -e$ és $\hbar = 2\pi\hbar$ helyettesítést alkalmaztuk.)

Látjuk tehát, hogy létezik egy karakterisztikus elemi mágneses fluxus $\Phi_{B0} = \hbar/e = 4.135 \times 10^{-11}$ [T cm²], amely kapcsolatban áll az interferenciakép maximumainak kialakulásával.

7.8. FLUXUSKVANTÁLÁS SZUPRAVEZETŐKBEN



50. ábra. Fluxuskvantálás szupravezető gyűrűben.

T_c kritikus hőmérséklet alatt fémek, félvezető oxidok, kerámiák szupravezetővé válnak, azaz az elektronok Cooper-párokba rendeződve ellenállásmentesen haladnak bennük. A Meissner-effektus szerint az elsőfajú szupravezetőkből kizorol a $\mathbf{B}$ mágneses tér. A Cooper-párok tehát mágneses tér mentes térrészben mozognak, állapotukat a $\psi_0(\mathbf{r})$ hullámfüggvény írja le.

Jelölje tehát egy tetszőleges $\mathbf{r}$ pontban $\psi_0(\mathbf{r})$ az elektronok külső mágneses tér nélkül kapott hullámfüggvényét, $\psi_B(\mathbf{r})$ pedig a $\mathbf{B}$ mágneses tér jelenléte esetén érvényes hullámfüggvényét. A két hullámfüggvény között az előzőek szerint csak egy, az $\mathbf{A}$ vektorpotenciállal kapcsolatos, egységnyi abszolútértékű fázisfaktor a különbség ($q = -2e$ a Cooper-párok miatt):

$$\Psi_B(\mathbf{r}) = \Psi_0(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} 2e \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{ds} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{s})},$$

ahol $\mathbf{r}_0$ -at a szupravezető gyűrű belsejében vettük fel. Ezen $\mathbf{r}_0$ pontból kiindulva, mindvégig a gyűrűben haladva, körbevihetjük zárt görbe mentén az $\mathbf{r}$ végpontot, hogy újra a kiindulási $\mathbf{r}_0$ ponthoz érjünk. Így a szupravezető gyűrűben (ld. 50. ábra): érvényesnek kell lennie a következő egyenlőségnek:

$$\Psi_B(\mathbf{r}_0) = \Psi_0(\mathbf{r}_0) e^{-\frac{i}{\hbar} 2e \oint \mathbf{ds} \mathbf{A}(\mathbf{s})} = \Psi_0(\mathbf{r}_0) e^{-\frac{i}{\hbar} 2e \Phi_B},$$

amelyből, az egyértékűség miatt

$$2n\pi = \frac{2e}{\hbar} \Phi_B \quad \rightarrow \quad \Phi_B = n \frac{\hbar}{2e} \equiv n \Phi_0.$$

Itt bevezettük a szupravezető által bezárt mágneses fluxus elemi kvantumát, amely számértéke cgs-egységben:

$$\Phi_0 = \frac{\hbar}{2e} = 2.07 \times 10^{-7} (\text{G cm}^2) = 2.07 \times 10^{-11} (\text{T cm}^2).$$

A mágneses fluxus szupravezető gyűrűk okozta kvantáltságát 1961-ben figyelték meg először. Az effektus azóta nagyprecíziós mérési eljárások részévé vált.

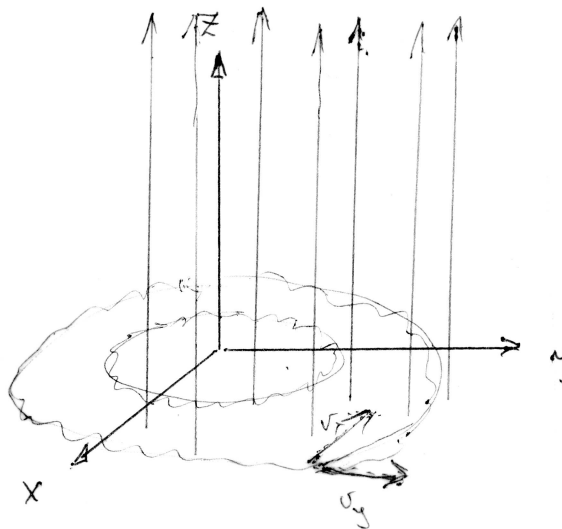
7.9. SZABAD ELEKTRONOK MOZGÁSA HOMOGEN MÁGNESES TÉRBEN (LANDAU-NÍVÓK)

Vegyük fel koordináta rendszerünk z -tengelyét a *homogén* mágneses tér által kijelölt irányban (51. ábra). Ekkor $\mathbf{B} = \vec{\nabla} \times \mathbf{A}$ miatt az $\mathbf{A}$ vektropotenciál merőleges a z -tengelyre, azaz írható:

$$\mathbf{B} = (0, 0, B), \quad \mathbf{A} = (A_x, A_y, 0).$$

A kinetikus impulzus

$$\mathbf{K} = m\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{p} - q\mathbf{A}$$



51. ábra. A $\mathbf{B}$ homogén mágneses térbeli elektronmozgás szemléltetése.

képlete miatt z -irányban továbbra is szabad mozgás jellemző, a mágneses potenciál csak az $x - y$ -síkbeli mozgásra van befolyással. Az energiaoperátor tehát

$$H = H_{\perp} + \frac{p_z^2}{2m}.$$

A z -irányú mozgás sajátfüggvénye a folytonos energiaspektrumba eső $\exp(\frac{i}{\hbar}p_z z)$ síkhullám. A z -re merőleges mozgás Hamilton operátora

$$H_{\perp} = \frac{m}{2} ((\dot{x})^2 + (\dot{y})^2) = \frac{1}{2m} ((m\dot{x})^2 + (m\dot{y})^2), \quad \text{amely az} \quad [m\dot{x}, m\dot{y}] = \frac{\hbar}{i} eB_z$$

felcserélési szabály miatt formális analógia fennállását sejteti a harmonikus oszcillátorral.

Az egydimenziós harmonikus oszcillátor energiaoperátorát a következőképpen is felírhatjuk (vö. 2. fejezet):

$$H^{HO} = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 = \frac{1}{2m} (P^2 + (m\omega X)^2), \quad \text{amelyre a} \quad [P, m\omega X] = \frac{\hbar}{i} m\omega$$

felcserélési törvény érvényes.

Ha tehát az

$$m\omega = eB \quad \rightarrow \quad \omega = \frac{e}{m}B \equiv \omega_c$$

megfeleltetést alkalmazzuk (ahol bevezettük az ω_c ún. *ciklotron frekvenciát*), akkor az analógia alapján a homogén mágneses térre merőleges irányú elektronmozgás energia sajátértékproblémáját megoldottnak tekinthetjük, mivel tudjuk, hogy

$$E^{HO} = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

s ezért

$$E_{\perp} = \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2}) = \frac{e\hbar}{m}B(n + \frac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Tehát z - irányú homogén mágneses tér esetén az $x - y$ síkbeli mozgás energiája kvantált. Ez annak következménye, hogy a kinetikus impulzusok nem felcserélhető volta miatt $\Delta v_x \Delta v_y \neq 0$, s így nem létezhet egyidejűleg határozott v_x és v_y sebességek által kijelölt folytonos pályaeloszlás az elektronmozgás számára az $x - y$ síkban.

7.10. HOMOGENEUS ELEKTROMOS TÉR HATÁSA AZ ATOMI NÍVÓKRA (STARK EFFEKTUS)

Tekintsünk egy homogén elektromos térbe helyezett hidrogénatomot. Az elektron mozgását leíró teljes energiaoperátor

$$H = H_0 + V,$$

ahol

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r},$$

a hidrogénatom belső állapotát leíró Hamilton operátor és

$$V = - \int (-e)\vec{\mathcal{E}}d\mathbf{s} = e\vec{\mathcal{E}}\mathbf{r} = e\mathcal{E}z$$

a z -irányultságú külső $\vec{\mathcal{E}} = (0, 0, \mathcal{E})$ elektromos tér hatását figyelembevevő (perturbációs) potenciál. ($\mathbf{F} = -\vec{\nabla}V = q\vec{\mathcal{E}}$.) E potenciális energia tényleg kis perturbációnak tekinthető, mivel az atomi elektromos terek nagyságrendje a laboratóriumban előállítható $\mathcal{E}_{labor}$ tereknél jóval nagyobb, azaz

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{a_0^2} \gg \mathcal{E}_{labor}.$$

Ezért az atomi szintek eltolódásának meghatározásához alkalmazhatjuk az elsőrendű perturbációszámítást. Ehhez, mint láttuk a

$$z_{nlm, n'l'm'} = \langle \psi_{nlm} | z | \psi_{n'l'm'} \rangle$$

matricelemet kell kiszámítani és azt is megállapítottuk korábban, hogy az $m = m', l = l' \pm 1$, kiválasztási szabályok érvényesek hidrogénatom pályák esetén.

Alkalmazzuk az elsőrendű perturbációszámítás energiaképletét a $k = 1$ -es alapállapot esetén.

$$E_k = E_k^{(0)} + E_k^{(1)} = E_1 + \langle \psi_{100} | V | \psi_{100} \rangle.$$

Alapállapotban tehát az elsőrendű korrekció zérus. Ahhoz, hogy a homogén elektromos tér hatását az alapállapoti szintre meghatározzassuk, a másodrendű energiakorrekció általános képletét alkalmazzuk:

$$E_k^{(2)} = \sum_{n \neq k} \frac{|\langle \psi_n | V | \psi_k \rangle|^2}{E_k - E_n} = \sum_{n=2} e^2 \mathcal{E}^2 \frac{|\langle \psi_{n10} | z | \psi_{100} \rangle|^2}{E_1 - E_n} = -\frac{9}{4} a_0^3 \mathcal{E}^2.$$

(E képlet nagyságrendjét minden számolás nélkül is megérthetjük: a számlálóbeli z -matricelem $\sim a_0$, míg a nevezőbeli energiatag $\sim e^2/a_0$ értéket vesz fel.)

Az alapállapoti szintek eltolódását (negatív irányba) másodrendű Stark-effektusnak nevezzük. Összehasonlítva a dielektrumok polarizálhatósági képletével

$$-\frac{1}{2} \alpha_p \mathcal{E}^2 \rightarrow \alpha_p = \frac{9}{2} a_0^3$$

adódik a H-atom polarizálhatóságára.

Amennyiben az $n = 2$ -es főkvantumszámmal jellemzett gerjesztett nívó energiaváltozása iránt érdeklődünk, az elsőrendű perturbációszámítást kell alkalmaznunk a négy azonos energiával rendelkező $|200\rangle, |210\rangle, |211\rangle, |21-1\rangle$ állapotra. Ezen állapotokat rendre az 1-es, 2-es, 3-as és 4-es indexszel jelölve, az energiafelhasadás $E^{(1)}$ elsőrendű korrekcióját megadó karakterisztikus matrix

$$0 = \begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} & V_{13} & V_{14} \\ V_{21} & V_{22} - E^{(1)} & V_{23} & V_{24} \\ V_{31} & V_{32} & V_{33} - E^{(1)} & V_{34} \\ V_{41} & V_{42} & V_{43} & V_{44} - E^{(1)} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -E^{(1)} & V_{12} & 0 & 0 \\ V_{21} & -E^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 - E^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E^{(1)} \end{vmatrix},$$

mivel a V_{12}, V_{21} matrixelemek kivételével az összes többi matrixelem eltűnik az $l = l' \pm 1$ és $m = m'$ kiválasztási szabályok miatt. Így

$$\left(E^{(1)}\right)^2 = V_{12}V_{21} = |\langle \psi_{210} | e\mathcal{E} z | \psi_{200} \rangle|^2 = e^2 \mathcal{E}^2 I^2,$$

ahol az integrál

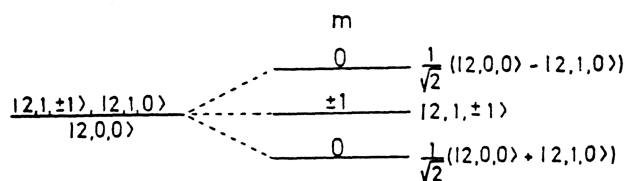
$$I = \int \psi_{210}^* z \Psi_{200} d\mathbf{r} = \int_0^\infty R_{21}(r) r R_{20}(r) dr \int_0^\pi d\theta \sin \theta Y_1^0(\theta) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} 2\pi = -3a_0$$

könnyen meghatározható. Tehát a második nívó

$$E_2^{(1)} = \pm 3a_0 e\mathcal{E}$$

energiával hasad fel. Fizikai értelmezése kézenfekvő, minthogy éppen ekkora energiával rendelkezik egy $3a_0$ hosszúságú e töltésű dipólus, amely az $\vec{\mathcal{E}}$ térben azzal egyező (+), illetve ellenkező (−) iránnyal áll be. Ez úgy valósul meg, hogy az elektromos térrel való kölcsönhatás megszünteti az eredetileg meglévő forgásszimmetriát, összekeveri az azonos mágneses kvantumszámhoz ($m = 0$), de különböző impulzusmomentumhoz ($l = 0, 1$) tartozó állapotokat. Az $m = \pm 1$ -hez tartozó szintek nem tolódnak el. (52. ábra.)

A gerjesztett állapotok dipólszerű felhasadását elsőrendű Stark-effektusnak hívjuk.



$$\frac{|1,0,0\rangle}{\sqrt{2}} \quad \left. \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right\} \frac{9}{4} a_0^3 \mathcal{E}^2$$

52. Ábra. H-nívók felhasadása homogén elektromos tér hatására.

8. RELATIVISZTIKUS KVANTUMMECHANIKA ÉS REPREZENTÁCIÓELMÉLET

E fejezet első részében az m_0 nyugalmi tömegű, feles spinű relativisztikus részecske kvantummechanikai tárgyalásával foglalkozunk. Látni fogjuk, hogy az eddig tanultak csak a kis sebességű mozgás esetére érvényesek. Így az előzőekben megismert Pauli-Schrödinger egyenlet a pontosabb leírást adó Dirac egyenlet kis sebességek esetén érvényes határesetének tekinthető csupán.

Előre bocsátjuk, hogy ezen fejezetben végig cgs egységben dolgozunk, valamint alkalmazzuk az Einstein-konvenciót: összegzés értendő szorzatban előforduló minden kettős indexre ($\mu, \nu, \dots$: négyes összegző indexek; $i, j, k, \dots$: hármas összegző indexek.) Továbbá egy felülhúzott nyíllal ($\vec{\gamma}$), vagy kövérszedéssel (**a**) jelölt vektor mennyiség alatt mindig hármas vektort értünk, és használjuk a $\partial/\partial x \equiv \partial_x$ rövidített írásmódot.

A fejezet második részében a fizikai mennyiségeket jelentő operátorok különböző reprezentációival foglalkozunk, amelyek közül eddig csak a koordináta reprezentációval ismerkedtünk meg behatóbban. Ezzel összefüggésben megemlítjük a kvantummechanikai képeket, amelyek az operátorok (fizikai mennyiségek) és a Hilbert térbeli állapotvektorok (fizikai állapotok) időfejlődésben játszott szerepének megválasztását jelentik.

Jegyzetünkben szorosán követjük Nagy Károly "Kvantummechanika" c. tankönyvében megadott menetet (IX. fejezet), amelyet további elmélyülést igénylő hallgatóknak figyelmébe ajánlok, Marx György jól bevált Kvantummechanika tankönyvével együtt.

8.1. A DIRAC EGYENLET

A speciális relativitáselmélet szempontjából az

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi, \quad H = \frac{p^2}{2m_0} + V,$$

($\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, $m = m_0/\sqrt{1-v^2/c^2}$) Schrödinger egyenlettel szembeni legnagyobb jogos kifogás az, hogy nyilvánvalóan nem Lorentz invariáns, mivel aszimmetrikus az idő- és tér-koordinátákban; idő-koordinátában csak elsőrendű, míg tér-koordinátákban másodrendű deriváltak szerepelnek benne.

Ezen a nehézségen segíteni lehet, ha kiindulunk a speciális relativitáselmélet egyik alapvető összefüggéséből,

$$p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + p_4^2 = -m_0^2 c^2, \quad (104)$$

amely az

$$\begin{aligned} x_1 &= x & p_1 &= m\dot{x}_1 \\ x_2 &= y & p_2 &= m\dot{x}_2 \\ x_3 &= z & p_3 &= m\dot{x}_3 \\ x_4 &= ict & p_4 &= m\dot{x}_4 = imc = \frac{i}{c}E \end{aligned}$$

definíciókból következik. (Kihasználtuk a közismert $E = mc^2$ relációt.)

Az impulzusokra a

$$p_\mu \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_\mu} \equiv \frac{\hbar}{i} \partial_\mu, \quad \mu = 1, \dots, 4,$$

hozzárendelést alkalmazva, a (104) összefüggés alapján a *Klein-Gordon egyenletet*

$$-\hbar^2 (\partial_1^2 + \partial_2^2 + \partial_3^2 + \partial_4^2) \Psi \equiv -\hbar^2 \partial_\mu \partial_\mu \Psi = -m_0^2 c^2 \Psi,$$

azaz

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 \right) \Psi = \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \Psi, \quad (104a)$$

amely már Lorentz-invariáns. Viszont időben másodrendű, ezért ahhoz, hogy az állapotfüggvényt időben nyomon követhessük, nem elegendő csupán $\Psi(t = t_0)$ megadása, szükség van a derivált, $\partial \Psi(t)/\partial t|_{t=t_0}$ egy t_0 időpillanatban való ismeretére is.

Hasonlóan a nemrelativisztikus Schrödinger egyenletnél követett eljáráshoz (ld. 2.2.c. pont), balról Ψ^* -gal beszorozva és integrálva a térkoordinátákra, a Klein-Gordon egyenletből is levezethető egy kontinuitási egyenlet:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \mathbf{j} = 0,$$

ahol

$$\mathbf{j} = \frac{1}{2m_0} \frac{\hbar}{i} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$$

és

$$\rho = \frac{1}{2m_0 c^2} \frac{\hbar}{i} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right).$$

Minthogy Ψ és $\partial\Psi/\partial t$ egymástól függetlenül megadható, a fenti egyenlettel értelmezett sűrűség negatív is lehet. Ezért nem lehetséges a valószínűségi értelmezés. További nehézséget jelent, hogy a spin bevétele a leírásba olyan módon, ahogy azt a Schrödinger egyenletnél tettük, elrontaná a Lorentz invarianciát. (A Klein-Gordon egyenlet a kvantumtérelméletben a zérus spinű részecskék, pl. pionok, állapotegyenlete).

Dirac nyomán az említett problémákon úgy segíthetünk, hogy gyököt vonunk a (104) egyenlet mindkét oldalából. A gyökvonást úgy végezzük el, hogy szimbolikus (γ) operátorok bevezetésével teljes négyzetté alakítjuk az egyenlet baloldalát:

$$-m_0^2 c^2 = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + p_4^2 = (\gamma_1 p_1 + \gamma_2 p_2 + \gamma_3 p_3 + \gamma_4 p_4)^2 \equiv (\gamma_\mu p_\mu)^2. \quad (104)$$

Így a gyökvonás eredménye,

$$im_0 c = \gamma_\mu p_\mu,$$

azonnal adja Dirac egyenletét ($p_\mu \rightarrow \hbar \partial_\mu / i$):

$$(\gamma_\mu \partial_\mu + \kappa) \Psi = 0, \quad (105)$$

ahol $\kappa = m_0 c / \hbar$ az m_0 tömegű részecske Compton hullámszáma. Bebizonyítható, hogy a (105) alatti egyenlet Lorentz invariáns (ld. Nagy Károly könyv).

Mielőtt a (105) Dirac egyenletet részletekbe menően vizsgálnánk, felderítjük a Dirac-féle "gamma-operátorok" mibenlétét. Feltételezzük, hogy $[\gamma_\mu, p_\nu] = 0$, $[p_\mu, p_\nu] = 0$, de $[\gamma_\mu, \gamma_\nu] \neq 0$. Elvégezzük a négyzetre emelést:

$$\begin{aligned} p_\mu p_\mu &= (\gamma_\mu p_\mu)^2 = \gamma_\mu^2 p_\mu^2 + \\ &+ \gamma_1 \gamma_2 p_1 p_2 + \gamma_1 \gamma_3 p_1 p_3 + \gamma_1 \gamma_4 p_1 p_4 \\ &+ \gamma_2 \gamma_1 p_2 p_1 + \gamma_2 \gamma_3 p_2 p_3 + \gamma_2 \gamma_4 p_2 p_4 \\ &+ \gamma_3 \gamma_1 p_3 p_1 + \gamma_3 \gamma_2 p_3 p_2 + \gamma_3 \gamma_4 p_3 p_4 \\ &+ \gamma_4 \gamma_1 p_4 p_1 + \gamma_4 \gamma_2 p_4 p_2 + \gamma_4 \gamma_3 p_4 p_3. \end{aligned}$$

Az egyenlőség akkor és csakis akkor áll fenn, ha teljesülnek a következő szabályok:

$$\begin{aligned} \gamma_\mu^2 &= 1, \quad \mu = 1, \dots, 4, \\ \gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu &= 2\delta_{\mu\nu}, \quad \mu, \nu = 1, \dots, 4. \end{aligned} \quad (106)$$

Azok a gamma operátorok, amelyek a fenti tulajdonságokat teljesítik, legkönnyebben matrix alakban (reprezentációban) adhatók meg:

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= \begin{pmatrix} & & -i \\ & i & \\ i & & \end{pmatrix}, \quad \gamma_2 = \begin{pmatrix} & & -1 \\ & 1 & \\ -1 & & \end{pmatrix}, \quad \gamma_3 = \begin{pmatrix} & -i & \\ i & & \\ & -i & \end{pmatrix}, \\ \gamma_4 &= \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (106a)$$

Könnyen belátható a gamma-matrixok hermiticitása is:

$$\gamma_\mu^+ = \gamma_\mu, \quad \mu = 1, \dots, 4,$$

ugyanis egy A matrix önadjungált, ha elemeire teljesül a következő összefüggés: $(A^+)_{rs} = A_{sr}^*$.

A gamma-matrixok hasonlóak a Pauli-féle spinmatrixokhoz, amelyek a feles spinoperátor matrix reprezentációjának felelnek meg: $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$, ahol

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} & 1 \\ 1 & \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} & -i \\ i & \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}.$$

A Pauli-matrixoknak is (106)-hoz hasonló tulajdonságaik vannak (négyzetük az egységmatrix és antikommutának), így nem véletlen, hogy a γ -matrixok kifejezhetők a σ -matrixokkal.

$$\vec{\gamma} = i \begin{pmatrix} & -\vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix},$$

ahol 1 a 2×2 -es egységmatrixot jelöli. (Később, a spin tárgyalásánál fogjuk látni, hogy a gamma- és σ -matrixok közti összefüggésnek mélyebb oka van.)

Visszatérve a (105) alatti Dirac egyenletre,

$$(\gamma_\mu \partial_\mu + \kappa 1) \Psi = 0,$$

(ahol 1 most a 4×4 -es egységmatrixot jelöli) megállapíthatjuk, hogy a Dirac-féle állapotfüggvény egy négykomponensű mennyiség,

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}.$$

Ψ nem vektor, hanem spinor, amely egy teljes forgatásra előjelet vált. A négy komponens jelentéséről később még szólnunk.

A kontinuitási egyenlet levezetése érdekében szükség van a Dirac-állapot (hermitikus) adjungáltjára:

$$\Psi^+ = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*),$$

valamint a Dirac egyenlet adjungáltjára:

$$(\partial_\mu \Psi)^+ \gamma_\mu^+ + \kappa 1 \Psi^+ = 0.$$

Mármost $(\vec{\partial}\Psi)^+ = \vec{\partial}\Psi^+$, és $(\partial_4\Psi)^+ = -\partial_4\Psi^+$, valamint a gamma-matrixok önadjungáltsága miatt az adjungált Dirac egyenlet, részletesen kiírva:

$$\partial_1\Psi^+\gamma_1 + \partial_2\Psi^+\gamma_2 + \partial_3\Psi^+\gamma_3 - \partial_4\Psi^+\gamma_4 + \kappa\Psi^+ = 0.$$

Az adjungált egyenletet még beszorozzuk jobbról γ_4 -gyel és kihasználjuk a gamma-matrixok antikommutációs tulajdonságát, hogy azonos előjelekkel ellátott tagokat kapjunk:

$$-\partial_1\bar{\Psi}\gamma_1 - \partial_2\bar{\Psi}\gamma_2 - \partial_3\bar{\Psi}\gamma_3 - \partial_4\bar{\Psi}\gamma_4 + \kappa\bar{\Psi} = 0, \quad (105a)$$

ahol még bevezettük a $\Psi^+ \gamma_4 \equiv \bar{\Psi}$ jelölést is. A továbbiakban ezt a módosított egyenletet hívjuk *adjungált Dirac egyenletnek* és $\bar{\Psi}$ -t *Dirac-adjungáltként*. Rövidített formába írva:

$$(\partial_\mu \bar{\Psi}) \gamma_\mu - \kappa \bar{\Psi} = 0 \quad / \Psi \quad \Rightarrow \quad (\partial_\mu \bar{\Psi}) \gamma_\mu \Psi - \kappa \bar{\Psi} \Psi = 0,$$

ahol a jobboldali egyenlet az adjungált egyenlet Ψ -vel jobbról történő beszorzása révén keletkezett.

Hasonlóan, a Dirac egyenlet és ennek $\bar{\Psi}$ -vel balról történő beszorzása révén keletkezett egyenlet a következő:

$$\bar{\Psi} / \gamma_\mu (\partial_\mu \Psi) + \kappa \Psi = 0 \quad \Rightarrow \quad \bar{\Psi} \gamma_\mu (\partial_\mu \Psi) + \kappa \bar{\Psi} \Psi = 0.$$

A két jobboldali egyenletet összeadva teljes négyes divergenciát kapunk, amely egy kontinuitási egyenletnek felel meg:

$$\partial_\mu (\bar{\Psi} \gamma_\mu \Psi) = 0 \quad \Leftarrow \quad \bar{\Psi} \gamma_\mu (\partial_\mu \Psi) + (\partial_\mu \bar{\Psi}) \gamma_\mu \Psi = 0.$$

Bevezetve a $\rho = \Psi^+ \Psi = \psi_\mu^* \psi_\mu \geq 0$ *valószínűségegsűrűség(!)* és a $\mathbf{j} = \vec{j} = ic \bar{\Psi} \vec{\gamma} \Psi$ (hármassvektor) *áramsűrűség* mennyiségeket, a teljes divergencia egy kontinuitási egyenlet szokásos alakját ölti:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \mathbf{j} = 0. \quad (107)$$

A Dirac egyenletből tehát következik a valószínűségi sűrűség megmaradását kifejező kontinuitási egyenlet, s így a Dirac egyenlet a Schrödinger egyenlet relativisztikus általánosításának tekinthető, annak minden elméleti és filozófiai következményével együtt. A következő fejezetekben éppen ennek az állításnak részletesebb kifejtésével fogunk foglalkozni.

8.2. AZ ELEKTROMÁGNESES TÉRREL KÖLCSÖNHATÓ RÉSZECSCKE DIRAC EGYENLETE

Elektromágneses tér jelenléte esetén a kanonikus impulzusok helyett a kinetikus impulzusokat kell használnunk (ld. előző fejezet):

$$p_\mu \rightarrow p_\mu - \frac{q}{c} A_\mu \equiv K_\mu, \quad \mu = 1, \dots, 4,$$

ahol q a részecske töltését jelöli, és $A_4 = i\Phi$. Azaz

$$\frac{\hbar}{i} \partial_\mu \rightarrow \frac{\hbar}{i} \partial_\mu - \frac{q}{c} A_\mu, \quad \mu = 1, \dots, 4,$$

s így

$$\partial_\mu \rightarrow \partial_\mu - \frac{iq}{\hbar c} A_\mu, \quad \mu = 1, \dots, 4.$$

A Dirac egyenlet elektromágneses tér esetén tehát:

$$\left[\gamma_\mu \left(\partial_\mu - \frac{iq}{\hbar c} A_\mu \right) + \kappa \right] \Psi = 0 \quad (108)$$

Kimutatható, hogy ez az egyenlet is Lorentz invariáns (ld. Nagy Károly könyv).

Kíváncsiak vagyunk a H energiaoperátor alakjára. Ezért átírjuk (108)-at

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \quad (108a)$$

formába, és leolvassuk H alakját. A negyedik (idő-) komponenst külön kezelve, a következőt kapjuk:

$$\left[\gamma_i \left(\partial_i - \frac{iq}{\hbar c} A_i \right) + \gamma_4 \left(\partial_4 - \frac{iq}{\hbar c} A_4 \right) + \kappa \right] \Psi = 0.$$

Szorozzuk be ezt az egyenletet balról $\hbar c \gamma_4$ -gyel, valamint vegyük figyelembe, hogy $\partial_4 = \partial_t / ic$, $A_4 = i\Phi$ és $\kappa = m_0 c / \hbar$. Kapjuk:

$$\left(\hbar c \gamma_4 \gamma_i \partial_i - \gamma_4 \gamma_i i q A_i + \frac{\hbar}{i} \partial_t + q \Phi + \gamma_4 m_0 c^2 \right) \Psi = 0.$$

Ebből átrendezéssel adódik a kívánt egyenlet forma:

$$i\hbar \partial_t \Psi = (\hbar c \gamma_4 \gamma_i \partial_i - i q \gamma_4 \gamma_i A_i + q \Phi + m_0 c^2 \gamma_4) \Psi.$$

A relativisztikus energiaoperátor alakja tehát:

$$H = \hbar c \gamma_4 \gamma_i \partial_i - i q \gamma_4 \gamma_i A_i + q \Phi + m_0 c^2 \gamma_4. \quad (109)$$

Gömbszimmetrikus elektromos tér esetén [$A_i = 0$, $\Phi = \Phi(r)$; pl. egy atomon belüli mag elektromos tér, amely az elektron mozgását meghatározza],

$$H = +i c \gamma_4 \gamma_i p_i + q \Phi(r) + m_0 c^2 \gamma_4 \xrightarrow{v \ll c} \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + q \Phi + \dots, \quad (109a)$$

amely átmegy a jól ismert nemrelativisztikus (kinetikus+potenciális energia) Hamilton operátor alakba (bizonyítás később). Az irodalomban a γ_μ -matrixok helyett általában az $\alpha_i = i\gamma_4 \gamma_i$ és $\beta = \gamma_4$ matrixokat használják. Ezekkel felírva a szabad ($A_\mu = 0$) Dirac energiaoperátor a következő alakot ölti:

$$H = c \alpha_i \mathbf{p}_i + m_0 c^2 \beta. \quad (109b)$$

8.3. A DIRAC EGYENLET ÉS A SPIN

Ebben a fejezetben kimutatjuk, hogy a Dirac egyenlet automatikusan számot ad a feles spin létéről. Emlékeztetünk arra, hogy az impulzusmomentum csererelációkkal történő (csoportelméleti) tárgyalása ugyancsak utalt a feles impulzusmomentum-kvantumszám létezésére. Ezt később a spinnel azonosítottuk a Stern-Gerlach kísérlet kapcsán. A spin kvantummechanikai tárgyalását a Schrödinger egyenlet keretében oly módon vittük végbe, hogy az energiaoperátorhoz egyszerűen hozzáírtuk a spin operátort tartalmazó mágneses térbeli potenciális energia tagot. Most látni fogjuk, hogy a Dirac egyenlet minden további kiegészítés nélkül tartalmazza a részecske spinjére vonatkozó információkat.

Matematikai és csoportelméleti tétel az, hogy centrális erőter esetén az impulzusmomentum állandó, megmaradó mennyiség (mozgásállandó). Mint láttuk, a mozgásállandók az energiaoperátorral

felcserélhetők (ld. 3.4. fejezet). Ezért a kérdés az, hogy a pályaimpulzus nyomaték, az $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, felcserélhető-e a Dirac-féle energiaoperátorral gömbszimmetrikus külső tér esetén (elegendő csak a z -komponensre bizonyítani):

$$\frac{dL_z}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, L_z] = \left[H, \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] = \frac{i}{\hbar} [H, (x_1 p_2 - x_2 p_1)] = ?$$

Az energiaoperátor gömbszimmetrikus külső elektromos tér esetén, mint láttuk, három tagból tevődik össze:

$$H = ic\gamma_4\gamma_i p_i + q\Phi(r) + m_0 c^2 \gamma_4. \quad (109a)$$

A második és harmadik tag zérust ad a felcserélés alkalmával, mivel nem függnek a φ azimutális koordinátától. Az első tag felcserélésénél pedig kihasználjuk a

$$[p_i, x_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}, \quad [p_i, p_j] = 0, \quad [x_i, x_j] = 0$$

kommutációs törvényeket, s ezért csak a $[H, x_1]$, ill. $[H, x_2]$ felcserélésekkel kell foglalkoznunk. Így például

$$[H, x_1] = ic\gamma_4\gamma_i [p_i, x_1] = ic\gamma_4\gamma_i \frac{\hbar}{i} \delta_{i1}.$$

Folytatva a levezetést:

$$\begin{aligned} \frac{dL_z}{dt} &= \frac{dL_3}{dt} = \frac{i}{\hbar} [ic\gamma_4\gamma_i p_i, (x_1 p_2 - x_2 p_1)] = \\ &= -\frac{c}{\hbar} \gamma_4\gamma_i \left[\frac{\hbar}{i} \delta_{i1} p_2 - \frac{\hbar}{i} \delta_{i2} p_1 \right] = ic\gamma_4(\gamma_1 p_2 - \gamma_2 p_1) \neq 0. \end{aligned}$$

Ciklikus felcseréléssel hasonló kifejezést kaphatunk a második és első komponensre.

$\mathbf{L}$ időben nem állandó volta azt jelenti, hogy a pályaimpulzus momentum nem a teljes impulzusmomentuma a Dirac egyenlet által leírt részecskének.

Jelöljük a teljes, megmaradó impulzusmomentumot $\mathbf{J}$ -vel, és a hiányzó impulzusmomentumot $\mathbf{S}$ -sel. A

$$\frac{d\mathbf{J}}{dt} = 0$$

teljes impulzusmomentum megmaradást kifejező egyenletből az ismeretlen $\mathbf{S}$ operátor meghatározható.

Bizonyítjuk, hogy $\mathbf{S}$ egy olyan vektor operátor, amelynek matrix-értékű komponensei

$$S_i = \frac{\hbar}{2} \Sigma_i, \quad \Sigma_i = -i\gamma_j\gamma_k, \quad (i, j, k) = \text{ps perm.}$$

kifejezhetők a Dirac-féle gamma matrixokkal. [Arról is meggyőződhetünk, hogy a 4×4 -es Σ matrixok rendre az ún. "nagy" Pauli-féle Σ -matrixok, amelyek a "kis" (2×2 -es) Pauli matrixok diagonálisba való szupermatrixszá történő elrendezéséből kaphatók meg:

$$\Sigma_i = \begin{pmatrix} \sigma_i & \\ & \sigma_i \end{pmatrix},$$

ahol a matrixon belül a "kis" Pauli matrixok szerepelnek. A Pauli-féle 2×2 -es szupermatrixos alakkal történő számolás általában hamarabb eredményre vezet, mint a 4×4 -es γ -matrixok használata.]

Bizonyítani fogjuk, hogy pl. $J_3 = L_3 + S_3$ időben állandó, azaz

$$\frac{dS_z}{dt} = -ic\gamma_4(\gamma_1 p_2 - \gamma_2 p_1).$$

Bizonyítás. A (109a) energiaoperátornak megint csak az első tagja ad járulékot a felcseréléshez:

$$\begin{aligned}\frac{dS_z}{dt} &= \frac{i}{\hbar}[H, S_z] = \frac{i}{\hbar}[ic\gamma_4\gamma_i p_i, \frac{\hbar}{2}\Sigma_3] = \\ &= -\frac{c}{2}[\gamma_4\gamma_i p_i, \Sigma_3] = -\frac{c}{2}[\gamma_4\gamma_i p_i, -i\gamma_1\gamma_2] = \\ &= +\frac{ic}{2}[\gamma_4\gamma_1 p_1 + \gamma_4\gamma_2 p_2 + \gamma_4\gamma_3 p_3, \gamma_1\gamma_2].\end{aligned}$$

A további kiértékelés érdekében felhasználjuk a gamma-matrixok (106) alatt ismertetett tulajdonságait:

$$\gamma_\mu^2 = 1, \quad \mu = 1, 2, 3, 4, \quad \text{és} \quad \gamma_\mu\gamma_\nu = -\gamma_\nu\gamma_\mu, \quad \mu \neq \nu.$$

A harmadik tag kommutátorát a legegyszerűbb kiértékelni, mivel

$$\gamma_4\gamma_3\gamma_1\gamma_2 = \gamma_1\gamma_2\gamma_4\gamma_3,$$

azaz a harmadik tag kommutátora zérust ad eredményül.

A második tag kiértékeléséhez figyelembe vesszük, hogy

$$\begin{aligned}[\gamma_4\gamma_2, \gamma_1\gamma_2] &= \gamma_4\gamma_2\gamma_1\gamma_2 - \gamma_1\gamma_2\gamma_4\gamma_2 \\ &= \gamma_1\gamma_4\gamma_2\gamma_2 + \gamma_1\gamma_4\gamma_2^2 = 2\gamma_1\gamma_4.\end{aligned}$$

Végül az első taghoz felhasználjuk, hogy

$$\begin{aligned}[\gamma_4\gamma_1, \gamma_1\gamma_2] &= \gamma_4\gamma_1\gamma_1\gamma_2 - \gamma_1\gamma_2\gamma_4\gamma_1 \\ &= \gamma_4\gamma_2 - \gamma_2\gamma_4 = -2\gamma_2\gamma_4.\end{aligned}$$

A három kommutátor együttesen tehát

$$+\frac{ic}{2}[-2\gamma_2\gamma_4 p_1 + 2\gamma_1\gamma_4 p_2 + 0p_3] = +ic[\gamma_1\gamma_4 p_2 - \gamma_2\gamma_4 p_1] = -ic\gamma_4[\gamma_1 p_2 - \gamma_2 p_1] = \frac{dS_z}{dt}.$$

Q.E.D.

Tehát a $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ operátor mozgásállandó centrális erőterben, de $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ és $\mathbf{S} = \hbar\vec{\Sigma}/2$, ($\Sigma_i = -i\gamma_j\gamma_k$) külön-külön nem! Mivel $\mathbf{S}$ -ről jóformán még semmit sem tudunk, joggal merül fel a kérdés, hogy mik a sajátértékei? $\mathbf{L}$ -nek már ismerjük a sajátértékeit; az egyik módszer a sajátértékek meghatározására éppen a felcserélési törvények alkalmazásával történt. Ezért kérdésünket úgy is megfogalmazhatjuk, hogy milyen felcserélési törvénynek tesznek eleget $\mathbf{S}$ komponensei, azaz

$$[S_i, S_j] = ?$$

Elegendő az első két komponensre számolni:

$$[S_x, S_y] \equiv [S_1, S_2] = \frac{\hbar^2}{4}[\Sigma_1, \Sigma_2] = -\frac{\hbar^2}{4}[\gamma_2\gamma_3, \gamma_3\gamma_1]$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\hbar^2}{4}(\gamma_2\gamma_3\gamma_3\gamma_1 - \gamma_3\gamma_1\gamma_2\gamma_3) = -\frac{\hbar^2}{4}(\gamma_2\gamma_1 - \gamma_1\gamma_2) \\
&= +\frac{\hbar^2}{2}\gamma_1\gamma_2 = +\frac{\hbar^2}{2}i(-i\gamma_1\gamma_2) = +\frac{\hbar}{2}\hbar i\Sigma_3 = \hbar iS_3 \equiv i\hbar S_z.
\end{aligned}$$

(Ezt az eredményt azonnal megkaphattuk volna a Pauli-matrixokra vonatkozó csererelációk felhasználásával.)

Tehát $\mathbf{S}$ az impulzusmomentum felcserélési szabályait elégíti ki, ezért sajátérték egyenleteit rögtön felírhatjuk az

$$\mathbf{S}^2\psi = \hbar^2 s(s+1)\psi, \quad s = 0, \underline{\frac{1}{2}}, 1, \underline{\frac{3}{2}}, \dots$$

és

$$S_z\psi = \hbar m_s\psi, \quad m_s = -s, -s+1, \dots, s-1, s.$$

alakban. Viszont a felcserélési törvény által megengedett lehetséges s kvantumszámok közül csak az $s = \frac{1}{2}$ van összhangban a gamma matrixok tulajdonságaival. Ugyanis $S_z = \frac{\hbar}{2}\Sigma_3$ lévén,

$$\Sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & 1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}.$$

A Σ_3 matrixnak viszont egységnyi abszolút értékű $\lambda = 2m_3$ sajátértékei vannak. A

$$(\Sigma_3 - \lambda)\psi = 0$$

sajátérték egyenletből

$$0 = \det |\Sigma_3 - \lambda| = \begin{vmatrix} 1-\lambda & & & \\ & -1-\lambda & & \\ & & 1-\lambda & \\ & & & -1-\lambda \end{vmatrix} = (1-\lambda)^2(1+\lambda)^2 \rightarrow \lambda = \pm 1.$$

Ezért $m_s = \pm \frac{1}{2}$ lehet csak, azaz $s = \frac{1}{2}$ sajátérték van csak összhangban a gamma matrixok tulajdonságaival.

Megállapíthatjuk tehát, hogy a Dirac egyenlet olyan részecske relativisztikus hullámegyenlete, amelynek spinje feles. A Dirac egyenlet a fermionok kvantummechanikai állapotegyenlete.

8.4. AZ ELEKTRON SAJÁT MÁGNESES MOMENTUMA

Emlékezzünk arra vissza, hogy a Schrödinger egyenletbe mesterségesen raktuk be az elektron spinjéből származó $\mathbf{M}^S$ mágneses nyomaték és egy $\mathbf{B}$ külső mágneses tér kölcsönhatásából származó $V_{\text{magn}}^S = -(\mathbf{M}^S, \mathbf{B})$ mágneses potenciális energiát tartalmazó tagot. Kérdés az, hogy a Dirac egyenlet vajon tartalmazza-e ezt a mágneses potenciállal kapcsolatos információt.

Mágneses tér esetén a $\mathbf{p}$ kanonikus impulzus helyett a $\mathbf{p} - q\mathbf{A}/c \equiv \mathbf{K}$ kinetikus impulzussal dolgozunk. (Továbbra is cgs egységet használunk, innen a c megjelenése, valamint a $\mathbf{B} = \text{rot}\mathbf{A}$ mágneses indukció vektort Gauss egységben mérjük.) Mágneses tér jelenléte esetén a Dirac egyenlet, amint azt (108) alatt láttuk, a következőképpen írható:

$$\left[\gamma_\mu \left(\partial_\mu - \frac{iq}{\hbar c} A_\mu \right) + \kappa \right] \Psi = 0.$$

A gömbölyű zárójelben a négyes kinetikus impulzussal arányos mennyiséget szokásos módon D_μ -val jelöljük, s így a Dirac egyenlet kompakt alakban írva:

$$(\gamma_\mu D_\mu + \kappa) \Psi = 0. \quad (110)$$

Célunk az, hogy a Dirac egyenletet nemrelativisztikus, $\mathbf{p}^2$ operátort is tartalmazó, Schrödinger egyenlet alakra hozzuk, s ebből leolvassuk a mágneses potenciál-tag létét, vagy nemlétét. Szorozzuk meg ezért az egyenletet balról a $(\gamma_\mu D_\mu - \kappa)$ operátorral:

$$(\gamma_\mu D_\mu - \kappa)(\gamma_\nu D_\nu + \kappa) \Psi = 0.$$

Azaz

$$(\gamma_\mu D_\mu \gamma_\nu D_\nu - \kappa^2) \Psi = 0. \quad (111)$$

Most az első három indexre vonatkozóan kihasználjuk a 7. fejezetben a kinetikus impulzusok felcserélési relációiról tanultakat:

$$[D_i, D_j] = -\frac{iq}{\hbar c} B_k, \quad (i, j, k) = \text{páros permutáció}$$

és

$$B_k = (\nabla \times \mathbf{A})_k = \epsilon_{ijk} \partial_i A_j.$$

Ezáltal a bonyolult négyzetes operátort a következőképpen alakíthatjuk tovább:

$$\begin{aligned} \gamma_\mu \gamma_\nu D_\mu D_\nu - \kappa^2 &= D_1^2 + D_2^2 + D_3^2 + D_4^2 - \kappa^2 \\ &+ \gamma_1 \gamma_2 D_1 D_2 + \gamma_2 \gamma_1 D_2 D_1 \\ &+ \gamma_1 \gamma_3 D_1 D_3 + \gamma_3 \gamma_1 D_3 D_1 \\ &+ \gamma_1 \gamma_4 D_1 D_4 + \gamma_4 \gamma_1 D_4 D_1 \\ &+ \gamma_2 \gamma_3 D_2 D_3 + \gamma_3 \gamma_2 D_3 D_2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +\gamma_2\gamma_4 D_2 D_4 + \gamma_4\gamma_2 D_4 D_2 \\
& +\gamma_3\gamma_4 D_3 D_4 + \gamma_4\gamma_3 D_4 D_3 = \\
& D_1^2 + D_2^2 + D_3^2 + D_4^2 - \kappa^2 \\
& +\gamma_1\gamma_2 [D_1, D_2] + \gamma_1\gamma_3 [D_1, D_3] \\
& +\gamma_1\gamma_4 [D_1, D_4] + \gamma_2\gamma_3 [D_2, D_3] \\
& +\gamma_2\gamma_4 [D_2, D_4] + \gamma_3\gamma_4 [D_3, D_4].
\end{aligned}$$

A további kiértékelés érdekében megvizsgáljuk azokat a tagokat, amelyekben γ_4 , ill. D_4 szerepel. Például:

$$\begin{aligned}
\gamma_1\gamma_4 [D_1, D_4] &= \gamma_1\gamma_4 (D_1 D_4 - D_4 D_1) \\
&= \gamma_1\gamma_4 \left[\left(\partial_1 - \frac{iq}{\hbar c} A_1 \right) \left(\frac{1}{ic} \partial_t + \frac{q}{\hbar c} \Phi \right) - \left(\frac{1}{ic} \partial_t + \frac{q}{\hbar c} \Phi \right) \left(\partial_1 - \frac{iq}{\hbar c} A_1 \right) \right] = \\
&= \gamma_1\gamma_4 \left[\frac{q}{\hbar c} [\partial_1, \Phi] - \frac{q}{\hbar c^2} [A_1, \partial_t] \right] \\
&= \gamma_1\gamma_4 \frac{q}{\hbar c} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x_1} + \frac{1}{c} \frac{\partial A_1}{\partial t} \right) = -\frac{q}{\hbar c} \gamma_1\gamma_4 \mathcal{E}_1 \equiv -\frac{q}{\hbar c} i\Sigma'_1 \mathcal{E}_1,
\end{aligned}$$

ahol felhasználtuk az

$$\vec{\mathcal{E}} = -\nabla \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

Maxwell-egyenletet, és bevezettük a γ_4 matrixszal kapcsolatos Σ'_i matrixot a következő definícióval:

$$\Sigma'_i = -i\gamma_i\gamma_4 = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & \\ & \vec{\sigma} \end{pmatrix}, \quad (i = 1, 2, 3).$$

(Emlékeztetünk arra, hogy a "nagy" Pauli matrixok kapcsolata a gamma matrixokkal:

$$\Sigma_i = -i\gamma_j\gamma_k = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & \\ & \vec{\sigma} \end{pmatrix}, \quad (ijk) = \text{páros permutáció.})$$

Folytatva a négyzetes operátor kiértékelését:

$$\begin{aligned}
& \gamma_\mu\gamma_\nu D_\mu D_\nu - \kappa^2 = \\
& D_\mu D_\mu - \kappa^2 + \frac{q}{\hbar c} (\vec{\Sigma}, \mathbf{B}) - i\frac{q}{\hbar c} (\vec{\Sigma}', \vec{\mathcal{E}}).
\end{aligned}$$

Tehát a (111) alatti "négyzetes" Dirac egyenlet a következő egzakt formába írható át:

$$(D_\mu D_\mu - \kappa^2) \Psi + \left[\frac{q}{\hbar c} (\vec{\Sigma}, \mathbf{B}) - i\frac{q}{\hbar c} (\vec{\Sigma}', \vec{\mathcal{E}}) \right] \Psi = 0. \quad (111)$$

(Az első tagban felismerhetjük a Klein-Gordon egyenletet, míg a második tag tartalmazza a spinnel való kölcsönhatásból származó információt.)

Most térünk át a nemrelativisztikus, kisenergiájú esetre. Az energia a D_4 operátorral kapcsolatos. Elvégezzük a közelítést.

$$\begin{aligned} D_4^2 &= \left(\partial_4 - \frac{iq}{\hbar c} A_4 \right)^2 = \left(\frac{1}{ic} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{q}{\hbar c} \Phi \right)^2 = \left(\frac{1}{\hbar c} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) + \frac{q}{\hbar c} \Phi \right)^2 = \\ &= \frac{1}{(\hbar c)^2} \left(-H + q\Phi \right)^2 = \frac{1}{(\hbar c)^2} (H' + m_0 c^2 - e\Phi)^2 = \left(\frac{m_0 c^2}{\hbar c} \right)^2 \left(1 + \frac{H' - q\Phi}{m_0 c^2} \right)^2 \\ &\approx \left(\frac{m_0 c}{\hbar} \right)^2 \left(1 + 2 \frac{H' - q\Phi}{m_0 c^2} \right) = \left(\frac{m_0 c}{\hbar} \right)^2 + \frac{2m_0}{\hbar^2} (H' - q\Phi) \approx \\ &\approx \left(\frac{m_0 c}{\hbar} \right)^2 + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi \right) = \kappa^2 - \frac{2m_0}{\hbar^2} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + q\Phi \right) \approx D_4^2. \end{aligned}$$

(Itt a $H' = -\frac{\hbar}{i} \partial_t$ helyettesítést alkalmaztuk.)

A (111) alatti "négyzetes" Dirac egyenlet, amelyet a következőképpen is írhatunk:

$$(\mathbf{D}^2 + D_4^2 - \kappa^2) \Psi - \frac{e}{\hbar c} [(\vec{\Sigma}, \mathbf{B}) - i(\vec{\Sigma}', \vec{\mathcal{E}})] \Psi = 0,$$

az előbbi közelítés elvégzése után a következő alakot ölti ($q = -e$):

$$\left(\mathbf{D}^2 - \frac{2m_0}{\hbar^2} \left(\frac{\hbar}{i} \partial_t - e\Phi \right) \right) \Psi - \frac{e}{\hbar c} [(\vec{\Sigma}, \mathbf{B}) - i(\vec{\Sigma}', \vec{\mathcal{E}})] \Psi = 0. \quad / - \frac{\hbar^2}{2m_0}$$

A jelölés szerint elvégezzük a beszorzást, és $-i\hbar \partial_t$ -t átviesszük a túloldalra:

$$\left(-\frac{\hbar}{2m_0} \mathbf{D}^2 - e\Phi + \frac{\hbar e}{2m_0 c} [(\vec{\Sigma}, \mathbf{B}) - i(\vec{\Sigma}', \vec{\mathcal{E}})] \right) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (112)$$

Ez viszont éppen a Pauli-Schrödinger egyenlet (ld. 4.5.3. fejezet) a szögletes zárójelben megjelenő második tagtól eltekintve! Erről a tagról viszont kimutatható, hogy a potenciális energiát jelentő $e\Phi$ taghoz képest elhanyagolható, mert annak $(v/c)^2$ -szerese. A szögletes zárójel első tagja éppen a spinmozgáshoz tartozó mágneses térbeli potenciális energia tag (ld. 4. fejezet): $V_{magn}^S = -(\mathbf{M}^S, \mathbf{B})$, ahol a spin-mágneses momentum $\mathbf{M}^S = -2\mu_B \frac{1}{\hbar} \mathbf{S} = -\mu_B \vec{\Sigma}$, $\mu_B = e\hbar/2m_0 c$. (A V_{magn}^L mágneses potenciális energiát a $\mathbf{D}^2 = (\partial_i + ieA_i/\hbar c)^2$ operátorból származtathatjuk le [ld.7. fejezet].) Most már csak azt kell belátni a 4. fejezethez való teljes összhang érdekében, hogy a $\vec{\Sigma}$ operátor sajátértéke ± 1 lehet csak. Ebből ui. következne, hogy a saját mágneses momentum $\mathbf{B}$ bármely irányára nézve: $\pm \frac{\hbar e}{2m_0 c} = \pm \mu_B$.

Bizonyítás. Kiindulunk a definícióból:

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma_1 \\ \Sigma_2 \\ \Sigma_3 \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} \gamma_2 \gamma_3 \\ \gamma_3 \gamma_1 \\ \gamma_1 \gamma_2 \end{pmatrix}.$$

A z -irányú komponensről már beláttuk, hogy sajátértéke ± 1 . Most belátjuk Σ_1 -ről is:

$$|\Sigma_1 - \lambda| = 0,$$

hiszen

$$\Sigma_1 = \begin{pmatrix} & 1 & \\ 1 & & \\ & & 1 \end{pmatrix},$$

és így

$$0 = \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & & \\ 1 & -\lambda & & \\ & & -\lambda & 1 \\ & & 1 & -\lambda \end{vmatrix} = -\lambda \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & & \\ 1 & -\lambda & & \\ & & -\lambda & 1 \\ & & 1 & -\lambda \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & & & \\ & -\lambda & 1 & \\ & 1 & -\lambda & \end{vmatrix} =$$

$$\lambda^2(\lambda^2 - 1) - (\lambda^2 - 1) = (\lambda^2 - 1)(\lambda^2 - 1) = (\lambda^2 - 1)^2 = 0 \rightarrow \lambda = \pm 1.$$

Hasonlóan, $|\Sigma_2 - \lambda| = 0$ -ból szintén következik: $\lambda = \pm 1$.

8.5. AZ ELEKTRON SZABAD MOZGÁSA ($A_\mu=0$).

Kiindulunk a (105) alatt megismert Dirac egyenletből:

$$(\gamma_\mu \partial_\mu + \kappa) \Psi = 0.$$

Kézenfekvő feltenni a kérdést: vajon a szabad Dirac egyenletnek is vannak síkhullám megoldásai? Tehát:

$$\Psi = C \exp(ik_\mu x_\mu)$$

megoldása-e a Dirac egyenletnek állandó (x_μ -független)

$$C = \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{bmatrix}$$

amplitúdók és k_μ , ($\mu = 1, \dots, 4$) állandók mellett? Amennyiben k_μ -ról kiderülne, hogy éppen a négyes hullámszám-vektor komponenseivel egyenlő, akkor a fenti megoldás tényleg a Schrödinger egyenletet is kielégítő korábban megismert síkhullám megoldás lenne (amely a valóságban előforduló hullámcsomag-megoldás extrém közelítése). Ugyanis

$$\begin{aligned} \Psi &= C \exp(ik_\mu x_\mu) = C \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_\mu x_\mu\right) = C \exp\left(\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}\mathbf{x} + p_4 x_4)\right) \\ &= C \exp\left(\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}\mathbf{x} + \frac{i}{c} E ict)\right) = C \exp\left(\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}\mathbf{x} - Et)\right). \end{aligned}$$

Behelyettesítve ezt a feltételezett megoldást a Dirac egyenletbe, kapjuk:

$$(\gamma_1 \partial_1 + \gamma_2 \partial_2 + \gamma_3 \partial_3 + \gamma_4 \partial_4 + \kappa) \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{bmatrix} e^{\frac{i}{\hbar} p_\mu x_\mu} = 0.$$

Kihasználva, hogy C komponensei a négyes térben állandók, elvégezhetjük a deriválásokat:

$$\frac{i}{\hbar} (\gamma_1 p_1 + \gamma_2 p_2 + \gamma_3 p_3 + \gamma_4 p_4 + \frac{\hbar}{i} \kappa) \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{bmatrix} = 0.$$

Homogén lineáris egyenletrendszert kaptunk C_μ -k meghatározására. Triviálistól különböző megoldás akkor és csakis akkor van, ha

$$\frac{i}{\hbar} \det \left| \gamma_\mu p_\mu + \frac{\hbar}{i} \kappa \right| = 0.$$

Részletesen kiírva:

$$\begin{aligned} & \frac{i}{\hbar} \det \left[i \begin{pmatrix} & & -p_1 \\ & -p_1 & \\ p_1 & & \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} & & -p_2 \\ & p_2 & \\ -p_2 & & \end{pmatrix} + \right. \\ & \left. + i \begin{pmatrix} & -p_3 & \\ p_3 & & p_3 \\ & -p_3 & \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p_4 & & \\ & p_4 & -p_4 \\ & -p_4 & \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \kappa & & \\ & \kappa & \\ & & \kappa \\ & & & \kappa \end{pmatrix} \right] = \\ & = \frac{1}{\hbar} \begin{vmatrix} p_4 + \frac{\hbar}{i} \kappa & 0 & -ip_3 & -ip_1 - p_2 \\ 0 & p_4 + \frac{\hbar}{i} \kappa & -ip_1 + p_2 & ip_3 \\ ip_3 & +ip_1 + p_2 & -p_4 + \frac{\hbar}{i} \kappa & 0 \\ ip_1 - p_2 & -ip_3 & 0 & -p_4 + \frac{\hbar}{i} \kappa \end{vmatrix} = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + p_4^2 + m_0^2 c^2 = 0. \end{aligned}$$

Ez viszont éppen megegyezik a (104) alatti alapösszefüggéssel. Tehát p_μ -t azonosíthatjuk a négyes impulzussal.

Vizsgáljuk a negyedik komponenst:

$$p_4 = i \frac{E}{c}.$$

Négyzetre emelve

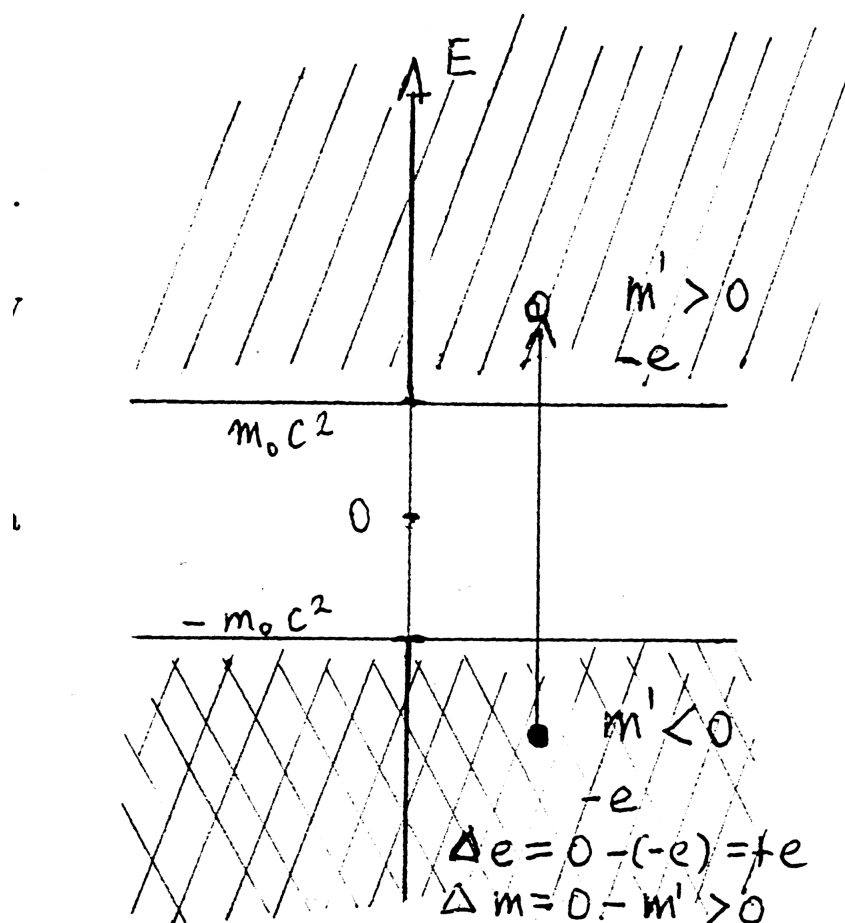
$$-p_4^2 = \frac{E^2}{c^2} = \mathbf{p}^2 + m_0^2 c^2 \quad \Rightarrow \quad E^2 = c^2 (\mathbf{p}^2 + m_0^2 c^2).$$

Gyököt vonva az energia négyzetéből,

$$E = \pm c \sqrt{\mathbf{p}^2 + m_0^2 c^2}. \quad (113)$$

kapjuk azt a nevezetes összefüggést, amely messzemenő következtetések levonását teszi lehetővé. Minthogy az impulzus abszolút értéke szabad részecske esetén 0 és $+\infty$ között tetszőlegesen változhat, (113) azt jelenti, hogy a részecske szabad (kinetikus) energiája $-\infty$ is lehet (ld. 53. ábra):

$$-\infty \leq E \leq -m_0 c^2 \quad \text{és} \quad m_0 c^2 \leq E \leq +\infty.$$



53. ábra. Szabad részecske lehetséges energiája és a párgerjesztés szemléltetése.

Az (113) egyenlettel kapcsolatban néhány lényeges megállapítást tehetünk:

- i) Az energia nem korlátos alulról;
- ii) A szabad részecske teljes energiája negatív is lehet.

Az i) megállapításból az következik, hogy nem létezik a nemrelativisztikus Schrödinger egyenlet tárgyalásánál tanult Rayleigh-Ritz-féle variációs elv. Nem alkalmazhatjuk tehát azokat a kényelmes módszereket, amelyek az energia korlátosságán alapulnak. Nagysebességű elektron mozgások esetén (ilyen található a nehéz atomokban is) a legtöbb kvantumkémiai módszer csődöt mond. [A probléma szép illusztrálását és egy kivezető út felvázolását találhatjuk meg a J.Chem.Phys. **80**, 4333, (1984) cikkben.]

A ii) megállapításból az következik, hogy minden részecskének van egy vele egyező tömegű, de ellentett töltésű antirészecske párja. Ez a következő módon látható be. Az alapvető Einstein reláció, az $E = -c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m_0^2 c^2} \equiv m' c^2$ összefüggés a negatív energiájú részecske tömegére $m' < 0$ negatív értéket jelent. Vegyünk ekkor egy pozitív és negatív tömegű elektront:

tömeg	töltés
$m' = m_e > 0$	$-e$
$m' = -m_e < 0$	$-e$

Ilyen rendszer létezése esetén azt tapasztalnánk, hogy az azonos töltések taszítása miatt a negatív tömegű részecske nem távolodna a pozitív tömegű elektrontól, hanem éppen vele egy irányba mozdulna el. Ilyen egyirányba haladó elektron "vonatokat" viszont eddig még soha nem figyeltek meg.

A probléma megoldására Dirac feltételezte 1927-ben, hogy az $m' = -m_e < 0$ tömegű elektronállapotok mind be vannak töltve az engedélyezett Pauli nívókon. Ez az ún. Dirac tenger, amelyet a vákuummal azonosítunk. Vákuum állapotban minden fizikai mennyiség (tömeg, töltés, stb.) értéke zérus, és minden fizikai mennyiség értéket ehhez képest figyelünk meg. Ha például elektromágneses gerjesztés révén egy negatív energiájú és így negatív tömegű elektront felgerjesztünk a pozitív energiájú tartományba, akkor az a jól ismert, pozitív tömegű elektronnak fog mérőműszereink számára megjelenni. A Dirac tengerben viszont hiányzni fog ez a negatív tömegű és töltésű elektron, s így a vákuum szerkezetében további változás figyelhető meg: egyúttal egy hiány, "lyuk" is keletkezik, amely $0 - m' = 0 - (-m_e) = m_e > 0$ tömeget és $0 - (-e) = +e$ töltést képvisel. Ezt az együttes folyamatot hívjuk párkeltésnek (ld. 53. ábra.). Az elektron tömegével azonos, de töltésével ellentétes, szimultán keletkező részecskét *pozitron*nak nevezzük. Anderson 1932-ben történt pozitron felfedezése a Dirac egyenlet nagy diadala volt.

Ezen megjegyzések után térjünk vissza röviden a szabad mozgás tárgyalásához. A teljes megoldáshoz a Ψ hullámfüggvényben szereplő C amplitúdó meghatározására is szükség lenne. Utalunk Nagy Károly Kvantummechanika c. könyvének IX. fejezetére, ahol a számolás részletezve van, itt csak a végeredményt foglaljuk össze.

A részletes tárgyalásból kiderül, hogy az állapotfüggvény első két komponense az ún. "nagy", a másik kettő pedig az ún. "kicsi" komponens, ami v/c -szerese a nagynak:

$$\Psi = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sim 1 \\ \sim 1 \\ \sim v/c \\ \sim v/c \end{bmatrix}$$

Másrészt, $v \sim c$ extrém relativisztikus esetben megmutatható, hogy a szabad részecske spinje és impulzusa egymáshoz képest csaknem párhuzamosan áll be: a spin és momentum egymáshoz viszonyított beállását *helicitás*nak (csavarodásnak) nevezzük és a

$$\hat{h} = \frac{\vec{\Sigma} \cdot \mathbf{p}}{p}$$

operátor várható értékével jellemezzük (amelyet h -val jelölünk). A számolásokból kiderül, hogy az adódó négy független megoldást az energia $E > 0, E < 0$ és $h = +1, h = -1$ négyféle párosításával jellemezhetjük.

Nemrelativisztikus közelítésben csak az első két komponensnek van szerepe:

$$\Psi_{E,h} \approx \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}.$$

A Dirac egyenletet csak erre a két komponensre redukálva (a nemrelativisztikus közelítés elvégzése után) éppen a (44) alatti Pauli egyenletet kapnánk vissza.

Megjegyezzük, hogy a Dirac egyenletnek akkor is van megoldása, ha az m_0 nyugalmi tömeg nulla. Szabad tér esetén:

$$\gamma_\mu \partial_\mu \Psi = 0. \quad (114)$$

Ez a Weyl egyenlet, amely például a szabad neutrínók viselkedését írja le.

8.6. A H-ATOM KVANTUMELMÉLETE A DIRAC EGYENET ALAPJÁN.

A pontos spektroszkópiai kísérletek megmutatták, hogy a hidrogénatom színeképe összetettebb, mint azt a Schrödinger egyenlet (Bohr képlet) alapján várjuk. Az elektronnak spinje révén saját mágneses momentuma is van és ez kölcsönhatásba lép a pályamomentummal arányos mágneses momentummal. Így, az ún. spin-pálya kölcsönhatás miatt a színekép finomszerkezetet mutat, amely a Dirac egyenlettel leírható. Mint láttuk, a Dirac egyenlet természetes módon tartalmazza az elektron spinjével kapcsolatos információkat is. A Dirac egyenlettel történő tárgyalás megmutatja, hogy a hidrogénatom energiaszintjei nemcsak az n főkvantumszámtól függnek, hanem az ℓ mellékvantumszámtól és a j teljes impulzusmomentum kvantumszámtól is ($j = \ell \pm 1/2$).

Kiindulunk a Dirac egyenlet (108a) alatti $i\hbar\partial_t\Psi = H\Psi$ alakjából, ahol H a (109) alatti Dirac Hamilton operátort jelöli. Minthogy a hidrogénatom problémájában a potenciál konzervatív ($\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0, \Phi(\mathbf{r}, t) = \phi(r)$), sőt gömbszimmetrikus, ezért szeparálhatjuk a hullámfüggvényt a szokásos módon: $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp(-iEt/\hbar)$. A megoldandó probléma tehát a következőképpen írható fel:

$$(H - E)\psi(\mathbf{r}) = 0, \quad H = \hbar c \gamma_4 \vec{\gamma} \vec{\partial} + e\phi + m_0 c^2 \gamma_4. \quad (115)$$

Vezessük be

$$\vec{\Sigma}' = -i\vec{\gamma}\gamma_4$$

vektoroperátort (amelyet az irodalomban általában $\vec{\alpha}$ -val jelölnek) a

$$\Sigma_i = -i\gamma_j\gamma_k,$$

(ijk = páros permutáció) mintájára. Könnyű belátni, hogy

$$\{\Sigma'_i, \Sigma'_j\} = 2\delta_{ij},$$

valamint, hogy $\vec{\Sigma}'$ és $\vec{\Sigma}$ között az összefüggés:

$$\vec{\Sigma}' = -\gamma_5 \vec{\Sigma}, \quad \gamma_5 = \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4.$$

Az itt bevezetett γ_5 operátornak a többi γ_μ operátorhoz hasonló tulajdonsága van:

$$\gamma_5 \gamma_\mu = -\gamma_\mu \gamma_5, \quad \gamma_5^2 = 1.$$

A feladat tehát a

$$H = c\vec{\Sigma}'\mathbf{p} + m_0c^2\gamma_4 + e\phi(r)$$

Hamilton operátorban előforduló $\vec{\Sigma}'\mathbf{p}$ operátor gömbi polárkoordinátákba való felírása. Felhasználjuk az ismert összefüggést:

$$(\vec{\Sigma}\mathbf{a})(\vec{\Sigma}\mathbf{b}) = (\mathbf{ab}) + i(\vec{\Sigma}, [\mathbf{a} \times \mathbf{b}]),$$

ahol $\mathbf{a}$ és $\mathbf{b}$ két, tetszőleges vektor operátor. Legyen $\mathbf{a} = \mathbf{r}$ és $\mathbf{b} = \mathbf{L}$:

$$(\vec{\Sigma}\mathbf{r})(\vec{\Sigma}\mathbf{L}) = (\mathbf{rL}) + i(\vec{\Sigma}, [\mathbf{r} \times [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]]) = i(\vec{\Sigma}, \mathbf{r}(\mathbf{rp}) - r^2\mathbf{p}) = i(\vec{\Sigma}, \mathbf{r})(\mathbf{rp}) - ir^2(\vec{\Sigma}\mathbf{p}),$$

ahol felhasználtuk az $\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{ac}) - (\mathbf{ab})\mathbf{c}$ összefüggést. Így tehát

$$ir^2(\vec{\Sigma}\mathbf{p}) = i(\vec{\Sigma}\mathbf{r})(\mathbf{rp}) - (\vec{\Sigma}\mathbf{r})(\vec{\Sigma}\mathbf{L}).$$

Átalakítva:

$$r^2(\vec{\Sigma}\mathbf{p}) = (\vec{\Sigma}\mathbf{r})\left((\mathbf{rp}) + i(\vec{\Sigma}\mathbf{L})\right).$$

$(-\gamma_5)$ -tel szorozva és r^2 -tel osztva kapjuk:

$$\begin{aligned} (\vec{\Sigma}'\mathbf{p}) &= (\vec{\Sigma}'\frac{\mathbf{r}}{r})\left(\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\mathbf{p}\right) + i\frac{(\vec{\Sigma}\mathbf{L})}{r}\right) = \\ \Sigma_r' \left(\frac{\hbar}{i}\nabla_r + i\frac{(\vec{\Sigma}\mathbf{L})}{r} + \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r} - \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r} \right) &= \\ \Sigma_r' \left(-i\hbar(\partial_r + \frac{1}{r}) + \frac{i}{r}((\vec{\Sigma}\mathbf{L}) + \hbar) \right). \end{aligned} \quad (116)$$

Tehát

$$\begin{aligned} H &= c\vec{\Sigma}'\mathbf{p} + m_0c^2\gamma_4 + e\phi(r) = \\ -i\hbar\Sigma_r'(\partial_r + \frac{1}{r}) + \frac{ic}{r}\Sigma_r'(\vec{\Sigma}\mathbf{L}) + \hbar + m_0c^2\gamma_4 + e\phi(r) &= \\ -i\hbar\Sigma_r'\frac{i}{\hbar}p_r + \frac{ic}{r}\Sigma_r'\gamma_4\Omega + m_0c^2\gamma_4 + e\phi(r), \end{aligned}$$

ahol bevezettük a $\gamma_4\Omega = \vec{\Sigma}\mathbf{L} + \hbar$ jelölést. Mármost belátható, hogy az Ω operátor felcserélhető az energia operátorral: $[H, \Omega] = 0$. Ugyanis

$$[\Sigma_r', \Omega] = 0, \quad [\gamma_4, \Omega] = 0, \quad [p_{-r}, \Omega] = 0.$$

Másrészt

$$\Omega^2 = (\vec{\Sigma}\mathbf{L} + \hbar)^2 = (\vec{\Sigma}\mathbf{L})^2 + 2\hbar(\vec{\Sigma}\mathbf{L}) + \hbar^2 = \left(\mathbf{L} + \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{4},$$

ugyanis

$$(\vec{\Sigma}\mathbf{L})^2 = (\vec{\Sigma}\mathbf{L})(\vec{\Sigma}\mathbf{L}) = (\mathbf{L}, \mathbf{L}) + i(\vec{\Sigma}, \mathbf{L} \times \mathbf{L}) = L^2 - \hbar(\vec{\Sigma}, \mathbf{L})$$

és $\vec{\Sigma}^2 = 3$. Tehát $\mathbf{S} = \hbar\vec{\Sigma}/2$ miatt

$$\Omega^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 + \frac{\hbar^2}{4} \equiv J^2 + \frac{\hbar^2}{4}.$$

A sajátértékegyenletet rögtön felírhatjuk:

$$\Omega^2 \eta_j = \hbar^2 (j(j+1) + \frac{1}{4}) \eta_j, \quad j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots,$$

azaz

$$\Omega^2 \eta_k = \hbar^2 k^2 \eta_k, \quad k^2 = (j + \frac{1}{2})^2 = 1^2, 2^2, 3^2, \dots,$$

avagy

$$\Omega \eta_k = \hbar k \eta_k, \quad k = (j + \frac{1}{2}) = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

Mivel H felcserélhető Ω -val, van közös sajátfüggvény rendszerük. Ezért a keresett energiasajátérték egyenlet:

$$\left[E \cdot 1 - e\phi(r) \cdot 1 - m_0 c^2 \gamma_4 + i\hbar \Sigma'_r \frac{i}{\hbar} p_r - \frac{i\hbar}{r} \Sigma'_r \gamma_4 \hbar k \right] \psi = 0.$$

Felhasználva a

$$\Sigma'_r = \begin{pmatrix} & -i & & \\ i & & -i & \\ & i & & \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix},$$

$$\Sigma'_r \gamma_4 = \begin{pmatrix} & i & & \\ i & & i & \\ & i & & \end{pmatrix}, \quad \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

konkrét előállításokat, a hidrogénatom sajátérték problémája a következőképpen írható fel:

$$(E - e\phi(r) - m_0 c^2) \psi_1(\mathbf{r}) + \hbar c (\partial_r + r^{-1}) \psi_3(\mathbf{r}) + \hbar c k r^{-1} \psi_3(\mathbf{r}) = 0, \quad (*)$$

$$(E - e\phi(r) - m_0 c^2) \psi_2(\mathbf{r}) + \hbar c (\partial_r + r^{-1}) \psi_4(\mathbf{r}) + \hbar c k r^{-1} \psi_4(\mathbf{r}) = 0,$$

$$(E - e\phi(r) + m_0 c^2) \psi_3(\mathbf{r}) - \hbar c (\partial_r + r^{-1}) \psi_1(\mathbf{r}) + \hbar c k r^{-1} \psi_1(\mathbf{r}) = 0, \quad (*)$$

$$(E - e\phi(r) + m_0 c^2) \psi_4(\mathbf{r}) - \hbar c (\partial_r + r^{-1}) \psi_2(\mathbf{r}) + \hbar c k r^{-1} \psi_2(\mathbf{r}) = 0.$$

Elegendő csak a két (*)-gal jelölt egyenlettel foglalkoznunk, mivel az alattuk lévő egyenletek egyszerű $1 \leftrightarrow 2, 3 \leftrightarrow 4$ egyidejű (és megengedett) helyettesítéssel ezekből megkaphatók. Más szóval, a ψ_1, ψ_3 komponensekre vonatkozó egyenletek ugyanazt az eredményt adják, mint a ψ_2, ψ_4 komponensekre vonatkozóak s így csak két komponenssel kell foglalkoznunk. A szög- és spinváltozók szeparálása után visszamaradó radiális komponenseket $f(r), g(r)$ -rel jelölve, azaz a

$$\Psi = \begin{pmatrix} \frac{1}{r} \\ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(r) F_{l j m_j m_s}(\vartheta, \varphi, s) \\ g(r) G_{l j m_j m_s}(\vartheta, \varphi, s) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_3 \end{pmatrix}$$

előállítást a Dirac egyenletbe való helyettesítés után a két megmaradó csatolt radiális egyenlet a következő:

$$(E - e\phi(r) - m_0 c^2) f(r) + \hbar c \frac{dg(r)}{dr} + \hbar c (k+1) \frac{1}{r} g(r) = 0,$$

$$(E - e\phi(r) + m_0 c^2) g(r) - \hbar c \frac{df(r)}{dr} + \hbar c (k+1) \frac{1}{r} f(r) = 0.$$

E csatolt radiális egyenletrendszer az $e\phi(r) = -e^2/r, E = \hbar\omega, m_0 c^2 = \hbar\omega_0, e^2/\hbar c \equiv \alpha = 1/137$ jelölések bevezetése után ugyanúgy a Sommerfeld-féle polinom módszerrel oldható meg, mint a nemrelativisztikus esetben. Először az aszimptotikus megoldást határozzuk meg: $f_a(r) = g_a(r) = \exp(-\beta r)$, ahol

$\beta = \sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}/c$. Majd a teljes megoldást ezen aszimptotikus megoldás és két ismeretlen polinom szorzataként vesszük fel. A regularitási követelmény miatt a polinomoknak véges fokszámúaknak kell lenni, valahol meg kell szakadni az összegzésnek. E megszakadás következményeként az E energiasajátértékekre csak az

$$E = m_0 c^2 \left[1 + \frac{\alpha^2}{(n' + \sqrt{k^2 - \alpha^2})^2} \right]^{-1/2} \quad (117)$$

sajátértékek adódnak $n' = 0, 1, 2, \dots$ sajátértékek mellett. Mint látjuk, az energiasajátérték most a $k = j + 1/2$, $j = \ell \pm 1/2$ kvantumszámoktól is függ, valamint tartalmazza az $\alpha = 1/137$ finomszerkezeti állandót. Felhasználva a kis x esetén érvényes $1/\sqrt{1+x} = 1 - \frac{1}{2}x + \frac{3}{4}x^2 - \dots$ sorfejtést, az energiasajátértéket jó közelítéssel az

$$E = m_0 c^2 \left[1 - \frac{\alpha^2}{2n^2} - \frac{\alpha^4}{2n^4} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right], \quad n = n' + j + \frac{1}{2}, \quad l - \frac{1}{2} \leq j \leq l + \frac{1}{2} \quad (117a)$$

képlettel adhatjuk meg.

A zárójelben álló első tag a relativisztikus tárgyalásból adódó nyugalmi energia járuléka. A második tag a Schrödinger egyenletből adódó Bohr-féle energiakifejezés. A harmadik tag megjelenése szolgáltat magyarázatot a hidrogénatom finomszerkezetére, amely tehát teljesen relativisztikus eredetű.

A sajátfüggvények meghatározását is magábafooglaló részletes tárgyalás iránt érdeklődőknek figyelmébe ajánljuk Marx György, illetve Nagy Károly Kvantummechanika tankönyveit.

8.7. A SPIN-PÁLYA KÖLCSÖNHATÁS

Az előző fejezetben említést tettünk az elektron spin és pályamozgása révén keletkező mágneses momentumok kölcsönhatásáról, amely a finomszerkezetet okozta az hidrogénatom színekében. Most ezen spinpálya kölcsönhatásnak általánosabb tárgyalását adjuk. Megvizsgáljuk, hogy a nemrelativisztikus közelítés esetén milyen formában jelentkezik a spinpálya kölcsönhatásból adódó energiaoperátor.

Tekintsük a

$$H = c\vec{\Sigma}'\mathbf{p} + m_0c^2\gamma_4 + V(r)$$

energiaoperátort ($\mathbf{A} = 0, V(r) = q\phi(r)$.)

A $\vec{\Sigma}'$ matrix kifejezhető a 2×2 -es Pauli matrixokkal:

$$\vec{\Sigma}' = \begin{pmatrix} 1 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Válasszuk le az energiából a nyugalmi energiát: $E = m_0c^2 + E'$. A Dirac egyenletet a 2×2 -es matrixok megjelenése miatt átírjuk a következő módon:

$$(E' \cdot 1 + m_0c^2 \cdot 1 - H)\psi = 0, \quad \psi = \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix}, \quad \psi_a = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \psi_b = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (118)$$

A H -beli $\gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ miatt (ahol 1 a 2×2 -es egységmatrixot jelöli) a következő csatolt egyenletrendszer kapjuk ψ_a és ψ_b meghatározására:

$$(E' - V(r))\psi_a = c(\vec{\sigma}\mathbf{p})\psi_b,$$

$$(E' + 2m_0c^2 - V(r))\psi_b = c(\vec{\sigma}\mathbf{p})\psi_a.$$

Ez utóbbiból kifejezhetjük ψ_b -t:

$$\psi_b = (E' + 2m_0c^2 - V(r))^{-1}c(\vec{\sigma}\mathbf{p})\psi_a,$$

és behelyettesíthetjük az első egyenletbe:

$$E'\psi_a = \left[c(\vec{\sigma}\mathbf{p})(E' + 2m_0c^2 - V(r))^{-1}c(\vec{\sigma}\mathbf{p}) + V \right] \psi_a.$$

Ez egy Schrödinger típusú energiasajátérték egyenletre hasonlít. Így a V potenciális tag melletti bonyolult tag a kinetikus energiaoperátort jelenti, amelyben az inverz operátort sorba fejthetjük $[(1+x)^{-1} = 1 - x + x^2 - \dots]$ felhasználásával a következőképpen:

$$\begin{aligned} & \left[c(\vec{\sigma}\mathbf{p})(E' + 2m_0c^2 - V(r))^{-1}c(\vec{\sigma}\mathbf{p}) + V \right] = \\ & \left[c(\vec{\sigma}\mathbf{p})(2m_0c^2)^{-1} \left(1 - \frac{E' - V(r)}{2m_0c^2} \right) c(\vec{\sigma}\mathbf{p}) + V \right] = \\ & \left[\frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^2(E' - V(r))}{4m_0^2c^2} + V(r) + \frac{1}{4m_0^2c^2}(\vec{\sigma}\mathbf{p})V(r)(\vec{\sigma}\mathbf{p}) \right]. \end{aligned}$$

Felhasználva (116)-ot a Dirac egyenletből végül is a következő egyenlet származtatható le:

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m_0^3 c^2} + V(r) - \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} \frac{dV}{dr} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2m_0^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} (\mathbf{S}, \mathbf{L}) \right] \psi_a = E' \psi_a.$$

Amint látjuk, az első és harmadik tag a szokásos kinetikus és potenciális energiaoperátorral egyezik meg, ami a nemrelativisztikus Schrödinger egyenletben szerepel. Ezért a mellettük megjelenő tagok a spin konzisztens tárgyalása és a relativisztikus tárgyalásmód következménye. Az utolsó tag a spin-pálya kölcsönhatásból eredő energiajárulék.

Most belátjuk, hogy az utolsó tag, az ún. 'spin-pálya kölcsönhatás' tag, a mágneses momentumok révén megvalósuló mágneses potenciális energiával arányos. A 4. fejezetben láttuk, hogy a spinhez, ill. pályamomentumhoz tartozó mágneses nyomaték

$$\mathbf{M}^L = -\frac{e\hbar}{2m_0 c} \frac{1}{\hbar} \mathbf{L} \equiv -\mu_B \frac{1}{\hbar} \mathbf{L},$$

$$\mathbf{M}^S = -2\mu_B \frac{1}{\hbar} \mathbf{S}$$

Ezért az utolsó tagot a következőképpen is írhatjuk

$$\frac{1}{e^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} (\mathbf{M}^S, \mathbf{M}^L).$$

$V(r) = -e^2/r$ esetén látjuk, hogy a spin-pálya tag r^{-3} -mal arányos és a bennszereplő konstans, valamint az előforduló effektív (Bohr-rádusz) távolságok miatt kicsi $V(r)$ -hez képest.

8.8. REPRESENTÁCIÓELMÉLET

8.8.1. FOLYTONOS ÉS DISZKRÉT REPRESENTÁCIÓK.

Tekintsük az

$$(E - H)|\psi\rangle = 0$$

stacionárius Schrödinger egyenletet, ahol $H = H(x_i, p_i, \Sigma_i, \dots)$ az energiaoperátor, amely függ az koordináta, impulzus, spin, ... operátoroktól, $|\psi\rangle$ pedig a kvantummechanikai rendszer E energiájú állapotát jellemzi.

A kvantummechanika axiómái közé tartozik az, hogy a fizikai mennyiségekhez absztrakt operátorokat, a fizikai állapotokhoz pedig Hilbert-térbeli absztrakt állapotvektorokat rendelünk. Kérdés az, hogy miként "reprezentáljuk" (jelenítsük meg, tegyük hozzáférhetővé a számolások számára) ezeket az absztrakt mennyiségeket. A választ a 3. fejezet elején egyszer már megfogalmaztuk: bárhogyan, csak arra kell ügyelnünk, hogy az egyes "reprezentált" operátorok kielégítsék a kvantummechanika alaptörvényét jelentő felcserélési relációkat, nevezetesen

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, 3.$$

A reprezentációelmélet alapját az az állítás (Riesz-Fischer tétel) képezi, hogy az egyes önadjungált operátoroknak *van* teljes sajátfüggvény rendszere (ez a bázis) és e szerint "reprezentálunk": az operátorokat matrixelemeikkel, az állapotokat pedig a kifejtési együtthatókkal.

Vannak folytonos és diszkrét reprezentációk, attól függően, hogy milyen operátor sajátállapot rendszere szerint akarunk reprezentálni. (A diszkrét reprezentációt szokták matrix, vagy n -reprezentációnak is hívni.) Van e kettő kombinációjából adódó ún. vegyes reprezentáció is, amikor az operátor sajátértékspektruma diszkrét és folytonos (ilyen pl. a hidrogénatom energiaoperátorának a spektruma).

Az x -reprezentációban (vagy koordináta reprezentációban) a bázist az $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$ sajátérték egyenlet összes $|x\rangle$ sajátállapota adja. Bár a 3. fejezetben foglalkoztunk már ezekkel a sajátállapotokkal és megállapítottuk róluk, hogy (x -reprezentációban) a Dirac-delta disztribúciókkal azonosak, erre a konkrét előállításra most nem lesz szükségünk, csupán a norma kifejezését kell ismernünk. (Folytonos spektrum esetén ez is Dirac-delta.)

Magát az $\hat{x}$ absztrakt operátort az $|x\rangle$ bázison vett matrixelemével reprezentáljuk koordináta reprezentációban:

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

ahol felhasználtuk a sajátértékegyenletet és a norma kifejezését.

A $\hat{p}$ -operátor matrixelemeinek definíciója az x -reprezentációban:

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

ugyanis csak így teljesül a $[\hat{p}, \hat{x}]$ kommutátor operátor matrixelemeire a felcserélési reláció:

$$\langle x'|[\hat{p}, \hat{x}]|x\rangle = \frac{\hbar}{i}\delta(x - x').$$

A $|\psi\rangle$ absztrakt állapotvektor kifejezhető az x -reprezentációhoz tartozó absztrakt $|x\rangle$ állapotok szerint, mivel azok teljes rendszert alkotnak ($\sum_x \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx$, $c_x = c(x)$):

$$|\psi\rangle = \sum_x c_x |x\rangle, \quad \text{ahol} \quad c_x = \langle x|\psi\rangle \equiv \psi(x).$$

Ez azt jelenti, hogy az absztrakt $|\psi\rangle$ állapotvektorhoz egyértelmű módon hozzárendelhető a $c_x \equiv \psi(x)$ folytonos számsorozat (függvény). Tehát az eddig állapotfüggvénynek, hullámfüggvénynek nevezett mennyiség nem más, mint az absztrakt $|\psi\rangle$ állapotvektor koordináta sajátállapotok szerinti kifejtésének együtthatói (függvényei).

A $(H - E)|\psi\rangle = 0$ absztrakt sajátérték egyenletből számokat (matrixelemeket) nyerhetünk, ha képezzük az $\langle x|$ absztrakt állapottal alkotott skalárszorzatát: $\langle x|H - E|\psi\rangle = 0$. Felhasználva az $1 = \sum_{x'} |x'\rangle\langle x'|$ teljességi relációt, a következő összefüggést nyerjük a fenti matrix elemre:

$$\begin{aligned} \langle x|(H(\hat{p}, \hat{x}, \dots) - E) \sum_{x'} |x'\rangle\langle x'|\psi\rangle &= \sum_{x'} \langle x|H(\hat{p}, \hat{x}, \dots) - E|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left(H\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'}, x', \dots\right) - E \right) \delta(x - x') \psi(x') = \left(H\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, x, \dots\right) - E \right) \psi(x) = 0. \end{aligned}$$

Tehát a stacionárius Schrödinger egyenlet nem más, mint a fenti operátor sajátérték egyenlet koordináta reprezentációbeli alakja. (Ezért hívják néha az x -reprezentációt Schrödinger reprezentációnak.)

Az p -, vagy impulzus reprezentációban a bázist a $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$ sajátérték egyenlettel meghatározott $|p\rangle$ sajátállapotok adják, amelyekkel a 3. fejezetben foglalkoztunk. A $\hat{p}$ operátor *diagonális* a p -reprezentációban:

$$\langle p'|\hat{p}|p\rangle = p \cdot \delta(p' - p) \quad .$$

Ahhoz, hogy a $[\hat{p}, \hat{x}] = \hbar/i$ operátor egyenlőség fennálljon, az $\hat{x}$ operátor p -reprezentációbeli matrixelemét a következőképpen kell választanunk:

$$\langle p'|\hat{x}|p\rangle = \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \delta(p' - p) \right) .$$

Ekkor ugyanis

$$\langle p'|[\hat{p}, \hat{x}]|p\rangle = \frac{\hbar}{i} \delta(p' - p) .$$

A teljesség kihasználásával felírjuk a Schrödinger egyenlet impulzus reprezentációs alakját:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle p|H - E|\psi\rangle = \langle p|H - E| \sum_{p'} |p'\rangle \langle p'|\psi\rangle = \sum_{p'} \langle p|H(\hat{p}, \hat{x}, \dots) - E|p'\rangle \langle p'|\psi\rangle \\ &= \int dp' \left(H(p', -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p'}, \dots) - E \right) \delta(p - p') \psi(p') \\ &= \left(H(p, -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}, \dots) - E \right) \psi(p) = 0. \end{aligned}$$

Példaként írjuk fel a harmonikus oszcillátor (HO) probléma energiaoperátorát:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{\hat{x}^2}{2M},$$

ahol $M^{-1} = D = m\omega^2$, a direkción erő. A megfelelő Schrödinger egyenlet impulzus reprezentációban:

$$\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial p^2} - E \right) \psi(p) = 0,$$

x -reprezentációban:

$$\left(\frac{x^2}{2M} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - E \right) \psi(x) = 0.$$

A HO probléma x - és p -reprezentációbeli szimmetriája szembeszökő (vö. határozatlansági reláció).

Másik példa legyen a lineáris potenciál, a $V = -kx$ problémája. A Schrödinger egyenlet p -reprezentációban

$$\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{\hbar k}{i} \frac{\partial}{\partial p} - E \right) \psi(p) = 0,$$

míg x -reprezentációban

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - kx - E \right) \psi(x) = 0.$$

Ennek a példának az érdekessége az, hogy p -reprezentációban van analitikus, zárt alakban írható megoldás, míg x -reprezentációban nincs. Tehát néha célszerűbb impulzus reprezentációban dolgozni.

Az eddigi reprezentációk folytonos spektrumhoz tartozó operátorok sajátállapotai szerinti reprezentációk voltak. Most megismerkedünk a *diszkrét*-, vagy matrix-reprezentációkkal, amelyeket

n –reprezentációknak is szoktak hívni. Az n –reprezentáció $|n\rangle$ bázisa tetszőleges, diszkrét spektrumot szolgáltató operátor sajátállapotaiként áll elő (ilyenek pl. a HO energiaállapotok). Az $\hat{x}$ –operátort az $\langle n'|\hat{x}|n\rangle \equiv x_{n'n}$, matrixelemekkel, a $\hat{p}$ –operátort az $\langle n'|\hat{p}|n\rangle \equiv p_{n'n}$, matrixelemekkel reprezentáljuk oly módon, hogy a $[\mathbf{p}, \mathbf{x}] = (\hbar/i) \cdot 1$ matrix egyenlőség teljesüljön. Egy $|\psi\rangle$ fizikai állapotot pedig a

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{bmatrix}$$

számoszloppal reprezentáljuk, ahol $c_n = \langle n|\psi\rangle$. Az $1 = \sum_{n'} |n'\rangle\langle n'|$ teljességet kifejező (operátor) összefüggést felhasználva, a Schrödinger egyenlet:

$$0 = \langle n|(H - E)|\psi\rangle = \sum_{n'} \langle n|(H - E)|n'\rangle \langle n'|\psi\rangle = \sum_{n'} (H_{nn'} - E\delta_{nn'})c_{n'} = 0,$$

azaz

$$(\mathbf{H} - E \cdot 1)\mathbf{c} = 0.$$

Itt $\mathbf{H}$ most az energiamatrixot jelöli, 1 pedig az egységmatrixot.

Konkrét diszkrét reprezentációnak az egységnyi tömegű és körfrekvenciájú HO bázisállapotokat választva ($|n\rangle \equiv \varphi_n^{HO}$) megmutatható, hogy

$$\mathbf{p} = \frac{\sqrt{\hbar/2}}{i} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

és

$$\mathbf{x} = \sqrt{\hbar/2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

Ebben a reprezentációban tehát

$$\begin{aligned} \mathbf{px} - \mathbf{xp} &= \frac{\hbar}{2i} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{6} & \dots \\ -\sqrt{2} & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & -\sqrt{6} & 0 & 1 & \dots \end{pmatrix} - \frac{\hbar}{2i} \begin{pmatrix} -1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & -1 & 0 & \sqrt{6} & \dots \\ -\sqrt{2} & 0 & -1 & 0 & \dots \\ 0 & -\sqrt{6} & 0 & -1 & \dots \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{i} \cdot 1. \end{aligned}$$

Azaz teljesül a felcserélési reláció.

Az energiaoperátor is kiszámolható. Egységnyi tömegű és egységnyi körfrekvenciájú oszcillátor energiaoperátora az adott HO reprezentációban

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2} + \frac{\mathbf{x}^2}{2} = \hbar \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 + \frac{1}{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 + \frac{1}{2} & \dots \end{pmatrix}$$

diagonális. A diagonális elemekben felismerjük a HO sajátértékeit.

Meg kell még vizsgálnunk a norma, teljesség és a különböző reprezentációk közti "átjárás" (transzformáció) kérdését.

Norma. Folytonos spektrumhoz tartozó reprezentáció esetén:

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

diszkrét reprezentáció esetén pedig

$$\langle n|n' \rangle = \delta_{nn'}.$$

A norma reprezentáció független, mivel az egy matrixelem, azaz szám.

Teljesség. Kiindulva a kifejtési tételből

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle = \sum_n |n\rangle c_n = \sum_n |n\rangle \langle n|\psi\rangle,$$

látjuk, hogy a teljesség kifejeződik az egységoperátorban:

$$1 = \sum_n |n\rangle \langle n| = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x|,$$

ahol az első összefüggés a diszkrét reprezentációkra, a második pedig a folytonos reprezentációk esetére vonatkozik. (Vegyes reprezentáció esetén a második egyenlőség jel helyett + áll.)

Mínt hogy a teljességet kifejező egységoperátor – lévén operátor – reprezentációtól nem független, vizsgáljuk meg, milyen matrixelemeket kapunk x -reprezentációban a folytonos, ill. diszkrét reprezentációk teljességét kifejező egységoperátorra.

Az x -reprezentáció teljességét kifejező egységoperátor matrixeleme x -reprezentációban

$$\langle x|1|x' \rangle = \sum_{x''} \langle x|x'' \rangle \langle x''|x' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx'' \delta(x - x'') \delta(x'' - x') = \delta(x - x');$$

az n -reprezentáció teljességét kifejező egységoperátor matrixeleme az x -reprezentációban:

$$\langle x|1|x' \rangle = \sum_n \langle x|n \rangle \langle n|x' \rangle = \sum_n \psi_n(x) \psi_n(x')^* = \delta(x - x'),$$

amely eredményt már a 4. fejezetben megismertük.

A teljességet kifejező egységoperátorok n -reprezentációbeli matrixelemei is mindkét esetben megegyeznek a normával:

$$\begin{aligned} \langle n|1|n' \rangle &= \sum_x \langle n|x \rangle \langle x|n' \rangle = \int dx \psi_n^*(x) \psi_{n'}(x) = \delta_{nn'}, \\ \langle n|1|n' \rangle &= \sum_{n''} \langle n|n'' \rangle \langle n''|n' \rangle = \sum_{n''} \delta_{nn''} \delta_{n''n'} = \delta_{nn'}. \end{aligned}$$

Két reprezentáció közti "átjárás" (transzformáció) *unitér* operátorokkal, ill. matrixokkal lehetséges.

Definíció: Unitér operátorok azok az operátorok, amelyek nem változtatják meg egy skalárszorzat értékét, azaz

$$\langle c|d \rangle = \langle Uc|Ud \rangle = \langle U^+Uc|d \rangle \rightarrow U^+U = 1 \rightarrow U^+ = U^{-1} \rightarrow UU^+ = 1.$$

Matrix reprezentációban az unitér feltétel:

$$\begin{aligned}\langle n|1|m\rangle &= \delta_{nm} = \langle n|U^+U|m\rangle = \sum_k \langle n|U^+|k\rangle \langle k|U|m\rangle \\ &= \sum_k \langle k|U|n\rangle^* \langle k|U|m\rangle = \sum_k U_{kn}^* U_{km}.\end{aligned}$$

Itt kihasználtuk, hogy az adjungált operátor matrixa egyenlő a transzponált matrix komplex konjugáltjával: $U^+ = (U^T)^*$.

Unitér matrixra példa: legyen $A = A^+$, ekkor

$$\begin{aligned}U &= e^{iA} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (iA)^n, \\ U^+ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-iA^+)^n = e^{-iA^+} = e^{-iA}.\end{aligned}$$

Vizsgáljuk meg általánosan, hogy milyen kapcsolat van két diszkrét reprezentáció között. Tartozzon ehhez a két reprezentációhoz az $|\omega_n\rangle$ és $|\eta_m\rangle$ bázisállapot sorozat. Egy tetszőleges fizikai állapot kifejezhető ezen bázisállapotok szerint és a kifejtési együtthatók egyértelműen jellemzik az állapotot:

$$|\psi\rangle = \sum_m a_m |\eta_m\rangle = \sum_n b_n |\omega_n\rangle$$

Azaz

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\eta} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix},$$

illetve

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\omega} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

A kérdés az, hogy az állapotfüggvény ezen kétféle reprezentációja között mi a kapcsolat, azaz hogyan fejezhető ki $b_m = \langle \omega_m | \psi \rangle$ együttható az $a_m = \langle \eta_m | \psi \rangle$ együtthatóval. A kapcsolat megtalálása érdekében fejtsük ki az $|\omega_m\rangle$ bázisfüggvényeket az $|\eta_n\rangle$ -ek teljes rendszere szerint:

$$|\omega_m\rangle = \sum_{n'} U_{mn'}^* |\eta_{n'}\rangle, \quad \text{ahol} \quad U_{mn'}^* = \langle \eta_{n'} | \omega_m \rangle = \langle \omega_m | \eta_{n'} \rangle^*.$$

Az adjungáltja:

$$\langle \omega_m | = \sum_{n''} \langle \eta_{n''} | U_{mn''}.$$

Ezzel

$$b_m = \langle \omega_m | \psi \rangle = \sum_{n''} \langle \eta_{n''} | U_{mn''} | \psi \rangle = \sum_{n''} U_{mn''} \langle \eta_{n''} | \psi \rangle = \sum_{n''} U_{mn''} a_{n''},$$

azaz $\mathbf{b} = \mathbf{U}\mathbf{a}$.

Most bizonyítjuk, hogy $\mathbf{U}$ unitér:

$$\langle \omega_n | \omega_m \rangle = \delta_{nm} = \sum_{n' n''} \langle \eta_{n''} | U_{nn''} U_{mn'}^* | \eta_{n'} \rangle = \sum_{n' n''} U_{nn''} U_{mn'}^* \delta_{n'' n'}.$$

$$= \sum_{n'n''} U_{nn''}(U^+)_{n'm} \delta_{n''n'} = \sum_{n'} U_{nn'}(U^+)_{n'm} = \delta_{nm}. \quad QED.$$

Folytonos reprezentációk közti transzformációt a

$$|\psi\rangle = \sum_x \psi(x)|x\rangle = \sum_p \psi(p)|p\rangle$$

egyenlőségből adódó

$$\psi(x) = \sum_p \psi(p) \langle x|p\rangle$$

transzformációs képlet adja, ahol az

$$\langle x|p\rangle \equiv U(p, x) = \frac{1}{\sqrt{h}} e^{\frac{i}{h} px},$$

(folytonos) unitér matrix éppen a koordináta reprezentációbeli impulzus sajátfüggvény (ld. 4.2 fejezet).

Most azt vizsgáljuk, hogy az *operátorok* különböző reprezentációi között mi a transzformáció. Írjuk fel a

$$(H - E)|\psi\rangle = 0$$

absztrakt Schrödinger egyenletet az "a" és "b" együttható sorozattal jellemzett η , ill. ω reprezentációban:

$$\mathbf{H}^{(\eta)} \mathbf{a} = E \mathbf{a}, \quad \mathbf{H}^{(\omega)} \mathbf{b} = E \mathbf{b}.$$

A kérdés tehát az, hogy miként fejezhetjük ki $\mathbf{H}^{(\eta)}$ -t $\mathbf{H}^{(\omega)}$ -vel?

Mivel

$$\mathbf{b} = \mathbf{U} \mathbf{a}, \quad \text{ahol} \quad \mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = 1,$$

írhatjuk:

$$\mathbf{H}^{(\omega)} \mathbf{U} \mathbf{a} = E \mathbf{U} \mathbf{a}.$$

Ezt $\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^\dagger$ -szal beszorozva, kapjuk:

$$\mathbf{U}^{-1} \mathbf{H}^{(\omega)} \mathbf{U} \mathbf{a} = E \mathbf{a} = \mathbf{H}^{(\eta)} \mathbf{a}.$$

Tehát a transzformációt szintén az $\mathbf{U}$ unitér matrix (operátor) biztosítja:

$$\mathbf{H}^{(\eta)} = \mathbf{U}^{-1} \mathbf{H}^{(\omega)} \mathbf{U} = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{H}^{(\omega)} \mathbf{U}.$$

Számítsuk most ki egy O operátor p -reprezentációbeli $\langle p|O|p'\rangle = O(p, p')$ és x -reprezentációbeli $\langle x|O|x'\rangle = O(x, x')$ matrixelemei közti transzformációt.

$$O(p, p') = \sum_{x, x'} U^\dagger(p, x) O(x, x') U(p', x') = \int dx \int dx' \frac{1}{h} e^{-i(px - p'x')/\hbar} O(x, x').$$

Legyen $O = x$. Ekkor $O(x, x') = \delta(x - x') \cdot x$. Ezért

$$\langle p|xp'\rangle = \int dx \int dx' \frac{1}{h} e^{-i(px - p'x')/\hbar} \delta(x - x') \cdot x = \int dx \frac{1}{h} e^{-i(p - p')x/\hbar} \cdot x$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial p'} \int e^{i(p'-p)x/\hbar} dx = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p'} \delta(p-p') = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \delta(p-p'),$$

ahol az utolsó egyenlőséget parciális integrálással kaptuk, és többször is kihasználtuk a $\delta(x) = \int \exp(ikx) dk / 2\pi$ ismert összefüggést. Így az x operátor p -reprezentációban $-(\hbar/i)(\partial/\partial p)$ lesz. Amit korábban csak "kitaláltunk", hogy a felcserélési reláció teljesüljön, most "kijött", általános reprezentációelméleti tételek felhasználásával.

8.8.2. KVANTUMMECHANIKAI KÉPEK.

Mindeddig olyan kvantummechanikai "képben" (ábrázolásban) dolgoztunk, amelyben az alapvető $(\hat{x}, \hat{p}, \dots)$ operátor "áll" (időtől független),

$$\frac{\partial \hat{a}}{\partial t} = 0,$$

és az időfüggést az állapotfüggvény $\Psi(t)$ hordozta az

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi(t)\rangle$$

állapotegyenlet révén, amelynek megoldását a

$$|\Psi(t_0)\rangle = |\varphi\rangle$$

kezdőfeltétel egyértelműen meghatározza. Ilyen absztrakt operátorokra példa a $\hat{H}$ energia, az $\hat{\mathbf{x}}$ koordináta, a $\hat{\mathbf{p}}$ impulzus, vagy az $\hat{\mathbf{L}}$ impulzusmomentum operátor.

Minthogy csak a matricelemeknek van fizikai jelentésük, elképzelhető más "szereposztás" az állapotok és operátorok között. Tekintsünk ugyanis egy matricelemet

$$\mathcal{A}(t) = \langle \Psi_1(t) | \hat{a} | \Psi_2(t) \rangle$$

és definiáljunk egy időfüggő unitér operátort a következőképpen:

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\varphi\rangle = U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle,$$

amelyből $U(t_0, t_0) = 1$ következik. Behelyettesítve a fenti definíciót a Schrödinger egyenletbe, $t_0 = 0$ kezdő időpillanatot választva és kihasználva a $|\varphi\rangle$ kiinduló állapot tetszőlegességét, az U operátorra az

$$i\hbar \frac{dU(t)}{dt} = \hat{H} U(t)$$

mozgásegyenlet adódik, amelynek adjungáltja, az energiaoperátor önadjungáltsága miatt ($\hat{H} = \hat{H}^+$ a Hilbert tér elemein), a következő:

$$i\hbar \frac{dU^+(t)}{dt} = -U^+(t) \hat{H}.$$

Az első egyenletet U^+ -szal balról, az adjungált egyenletet U -val jobbról beszorozva, majd az így nyert egyenleteket összeadva a következő összefüggést kapjuk:

$$i\hbar \frac{dU(t)^+ U(t)}{dt} = -U(t)^+ \hat{H} U(t) + U(t)^+ \hat{H} U(t) = 0.$$

Másrészt $U^+(t_0) = 1$, tehát $U^+(t_0)U(t_0) = 1$, és így az előző eredményünkéből tetszőleges időpillanatra is

$$U^+(t)U(t) = 1,$$

amellyel az $U(t)$ operátor unitaritását bizonyítottuk.

Ezzel az időfejlesztő unitér operátorral előállíthatunk a Schrödinger képből olyan kvantummechanikai képet, az ún. *Heisenberg képet*, amelyben az operátorok "mozognak" (időfüggők) és az állapotok "állnak" (időfüggetlenek):

$$\mathcal{A}(t) = \langle \Psi_1(t) | \hat{A} \Psi_2(t) \rangle = \langle U(t) \varphi_1 | \hat{A} U(t) \varphi_2 \rangle = \langle \varphi_1 | U^+(t) \hat{A} U(t) \varphi_2 \rangle \equiv \langle \varphi_1 | \hat{A}(t) \varphi_2 \rangle.$$

Kérdés, mi a dinamikai egyenlet a most kapott időfüggő $\hat{A}(t)$ operátorra?

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{A}(t)}{dt} &= \frac{d}{dt} \left(U^+(t) \hat{A} U(t) \right) = \frac{i}{\hbar} \left[U^+(t) \hat{H} \hat{A} U(t) - U^+(t) \hat{A} \hat{H} U(t) \right] = \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[U^+(t) \hat{H} U(t) U^+(t) \hat{A} U(t) - U^+(t) \hat{A} U(t) U^+(t) \hat{H} U(t) \right] = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}(t) \hat{A}(t) - \hat{A}(t) \hat{H}(t) \right]. \end{aligned}$$

Megkaptuk az időfüggő operátorokra vonatkozó mozgásegyenletet, amelyet érdemes összefoglalva újra kiírni:

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}(t) \hat{A}(t) - \hat{A}(t) \hat{H}(t) \right] = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}(t), \hat{A}(t) \right].$$

Az energiaoperátor mozgásállandó, mivel

$$\frac{d\hat{H}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}(t) \hat{H}(t) - \hat{H}(t) \hat{H}(t) \right] = 0,$$

azaz $\hat{H}(t) = \hat{H}$ = állandó időben, s így a 3. fejezetben megismert

$$\frac{d\hat{O}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H} \hat{O} - \hat{O} \hat{H} \right]$$

kvantummechanikai időderivált definíciószerű bevezetésének oka nyilvánvalóvá válik. Egyben látjuk a Hamilton operátor kitüntetett szerepét, amelynek állandóságából

$$i\hbar \frac{dU(t)}{dt} = \hat{H} U(t) = \hat{H} U(t)$$

írható, amelynek megoldása

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

Megjegyezzük még röviden, hogy van még egy "vegyes" kvantummechanikai kép is, az ún. *kölcsönhatási* (vagy Dirac) kép, amelyben mind az operátor, mind az állapot mozoghat. Ennek fontossága a perturbáció számítás területén mutatkozik meg. Ekkor a $\hat{H}$ teljes energiaoperátor felbontható egy

H_0 ismert és egy K "kölsönhatási" (gyenge) részre, amit perturbációként kezelünk: $H = H_0 + K$. Az operátorok mozgását H_0 kormányozza:

$$\frac{d\mathbf{A}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H_0, \mathbf{A}(t)],$$

míg az állapotot K határozza meg:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = K\psi(t).$$

Összefoglalásképpen:

Schrödinger kép	Heisenberg kép	Dirac kép
$\frac{\partial \hat{a}}{\partial t} = 0$	$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}(t), \hat{A}(t)] + \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t}$	$\frac{d\mathbf{A}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H_0, \mathbf{A}(t)] + \frac{\partial \mathbf{A}(t)}{\partial t}$
$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = \hat{H}\Psi(t)$	$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0$	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = K\psi(t)$
$\mathcal{A}(t) = \langle \Psi_1(t) \hat{a} \Psi_2(t) \rangle$	$\mathcal{A}(t) = \langle \varphi_1 \hat{A}(t) \varphi_2 \rangle$	$\mathcal{A}(t) = \langle \psi_1(t) \mathbf{A}(t) \psi_2(t) \rangle$