

Benedict Mihály

Kvantummechanika

számítógépes animációkkal

Animációk, feladatok, ábrák, tesztek:

Czirják Attila

Dömötör Piroska

Földi Péter

Szegedi Tudományegyetem

Elméleti Fizikai Tanszék

Szeged 2010

ELŐSZÓ

Ez a jegyzet a kvantumfizika egyetemi szintű tanulmányozásához készült, elsősorban annak elméleti vonatkozásaira fektetve a hangsúlyt. Az I. rész egy BSc szintű kvantumfizikai előadás megértését segíti elő, míg a II. rész egy haladóbb kvantummechanika kurzus követését teszi lehetővé. Mindazonáltal a kvantummechanika mélyebb atom- vagy molekulafizikai alkalmazásaihoz olyan további ismeretek is szükségesek, amelyek ebben a jegyzetben nem találhatók meg. A cél itt csupán a kvantummechanika alapjainak elsajátítása lehet.

A jegyzetben a tananyaghoz mintegy 110 feladat csatlakozik, amelyek önálló megoldása jelentősen elősegítheti az anyag elsajátítását. Az elektronikus forma lehetővé tette, hogy olyan demonstrációs és interaktív animációkat is csatoljunk az anyaghoz, amelyek nagyban megkönnyítik a kvantummechanika igencsak absztrakt fogalmainak és törvényszerűségeinek megértését. Ezek – mint a fizikában általában – mennyiségi, azaz kvantitatív összefüggések, amelyek lényege és igazi tartalma a megfelelő mélységben birtokolt matematikai ismeretek révén ragadhatók meg. Ezt a nehéz feladatot igyeksenek reményeink szerint előmozdítani az itt elérhető multimédiás anyagok. Hasonló – multimédiás eszközöket tartalmazó – tankönyvekre van néhány példa angol nyelven, de a magyar nyelvű egyetemi anyagok között ezt a jegyzetet ebből a szempontból úttörőnek gondoljuk.

Az animációk a szövegből táblázattal kimelve, a táblázatban szereplő hiperlinkekre kattintva érhetők el, melyek legtöbbször valamilyen dinamikai folyamatot szemléltetnek. Vannak köztük egyszerűbb – csupán demonstrációt szolgáló programok, és vannak olyanok, amelyek interaktívak. Ez utóbbiakban a paraméterek változtatásával a felhasználó különböző fizikai szituációkat leíró modellekkel találkozhat.

Az egyes programok illetve animációk indításához a számítógépen a következő programok megléte vagy installálása szükséges:

SZÜKSÉGES PROGRAMOK	
	Az interaktív tartalmak egy részének megjelenítéséhez szükséges a java környezet (JRE) letöltése és telepítése. A bal oldali linkekre kattintva letölthetjük az operációs rendszerünknek megfelelő java környezetet.
	Az interaktív tartalmak másik részének megjelenítéséhez a Mathematica Notebook Player program megléte szükséges. Ez a bal oldali linkekre kattintva a kérdőív kitöltése után letölthető.
	A videók jelentős része flv formátumú Flash videó. Ezeket a „szokásos médialejátszók” általában csak a megfelelő Adobe-Flash plugin megléte esetén képesek lejátszani. Ezt a bal oldali linkekre kattintva az Adobe honlapjáról tölthetjük le. Az swf formátumú flash animációk megtekintéséhez pedig mindenképpen szükséges ez a plugin.
	A flash videók lejátszására a másik lehetőség, hogy letöltsük az ingyenesen elérhető VLC Media Player -t. Ez a program rendkívül sokféle videó- és hang formátumot kezel, többek között az flv formátumú videókat is lejátsza.

Az I. illetve a II. rész végén egy-egy TESZT is található, amelyre rákattintva feleletválasztós kérdésekre adott válaszokkal ellenőrizheti tudását a hallgató. A kérdéssorozatot a számítógép véletlenszerűen állítja elő úgy, hogy tesztenként több mint 10^6 számú kérdéssor lehetséges, elegendően széles körben fedve le a legfontosabb ismereteket.

A kvantummechanika nem könnyű tantárgy, de a modern fizika legalapvetőbb törvényszerűségeinek működését érthetjük meg általa. Ennek a kihívásnak a teljesítéséhez, mint általában minden komolyabb új ismeret elsajátításához kemény és önálló munkára van szükség. Ehhez kíván hasznos segítséget nyújtani a jegyzet.

Tartalomjegyzék

I.	5
1. Az üregsugárzás törvényei	5
1.1. A Wien-féle eltolódási törvény és a Stefan-Boltzmann törvény	5
1.2. A hullámhossz szerinti eloszlás magyarázata	6
2. A fotonhipotézis, a fény részecske természete	10
2.1. A fotoeffektus vagy fényelektromos hatás	10
2.2. A foton impulzusa	12
2.3. A Compton-effektus	12
2.4. A gravitációs vöröseltolódás	14
2.5. A foton impulzusnyomatéka	14
3. Atomok vonalas színe, a Bohr-féle posztulátumok és a hidrogénatom Bohr-modellje	15
3.1. A Bohr-féle posztulátumok	17
3.2. A hidrogénatom Bohr-féle modellje	17
4. Feles spin és fotonpolarizáció	22
4.1. Stern-Gerlach berendezések	22
4.2. Fotonok polarizációja	24
4.3. A valószínűségi amplitúdó fogalma	27
4.4. Általánosítás kettőnél több dimenzióra	30
5. Kvantumkriptográfia, kvantum titkosítás kétállapotú kvantumrendszerrel	31
5.1. Klasszikus kriptográfia	31
5.2. Kvantumkriptográfia és a BB84 protokoll	32
6. EPR-paradoxon, Bell-egyenlőtlenség	35
7. Kétréses kísérlet, hullámfüggvény	41
8. De Broglie-hullámok, szabad részecske Schrödinger-egyenlete	44
8.1. A de Broglie-féle hullám	45
8.2. A szabad részecske Schrödinger-egyenlete	46
9. Az egydimenziós mozgás Schrödinger-egyenlete	48
9.1. Kvantumos kauzalitás	49
9.2. Linearitás	49
9.3. A valószínűség megmaradása, a kontinuitási egyenlet	50
10. Várható érték, szórás	51
11. Az impulzus és a koordináta operátorának bevezetése	53
11.1. X és P nem fölcserélhető	55
11.2. Háromdimenziós mozgás	55
12. Az energiasajátérték-egyenlet	56

13. Végtelen potenciálgödörbe zárt részecske	57
13.1. Az energiasajátfüggvények és sajátértékek meghatározása	58
13.2. Kifejtés a sajátfüggvények szerint	61
13.3. A sajátfüggvények paritása	61
14. Részecske háromdimenziós dobozban	64
14.1. Speciális eset: kockába zárt részecske ($a = b = c$)	66
15. Mozgás általános egydimenziós potenciálokban	67
16. Véges magasságú, szimmetrikus potenciálgödörben lévő részecske	70
16.1. Kötétt állapotok	71
16.2. Szórt állapotok	75
17. A kvantummechanika szabályai	80
II.	85
18. Hilbert-tér és lineáris operátorai, Dirac-jelölés	85
18.1. Lineáris operátorok	87
18.2. Reprezentációk, operátorok mátrixa	88
18.3. Bázisváltás, más kifejtési együtthatók	90
18.4. Projekciós operátor	91
19. Önadjungált operátorok spektrális előállítása	92
20. Fölcserélhető operátorok, CSCO	95
20.1. Fölcserélhető operátorok sajátvektorairól	95
20.2. Fölcserélhető operátorok teljes rendszere: CSCO	95
21. L^2 és az L^2-höz nem tartozó bázisok	96
21.1. Az L^2 tér definíciója	96
21.2. Az L^2 -höz nem tartozó, általánosított bázisok	100
21.2.1. Síkhullámok	100
21.2.2. Delta-függvények	100
21.2.3. Egyéb általánosított bázisok	101
22. A koordináta és az impulzus operátora	101
22.1. X és P nem fölcserélhető	103
23. A kvantummechanika posztulátumai	104
24. Mérések, középérték, szórás	106
25. Heisenberg-egyenlőtlenség	107
26. Időfejlődés, kontinuitási egyenlet	111
26.1. A Schrödinger-egyenlet általános tulajdonságai	111
26.2. Kontinuitási egyenlet	112
27. A várható értékek időfejlődése, Ehrenfest tétele	113
28. Konzervatív rendszerek	114

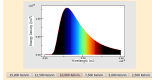
29. Mozgásállandók, Bohr-frekvenciák	115
29.1. Mozgásállandók	115
29.2. Bohr-frekvenciák és a kiválasztási szabályok eredete	116
30. A szabad részecske kvantummechanikai tárgyalása	117
31. A harmonikus oszcillátor sajátérték-problémája	119
32. Nemstacionárius állapotok harmonikus potenciálban, koherens és préselt állapotok	124
32.1. Koherens állapotok	126
32.2. Préselt koherens állapotok	129
33. Az impulzusnyomaték algebrai elmélete	130
34. Feles spin sajátállapotai	135
35. Pályaimpulzusnyomaték	137
36. A térbeli paritás	142
36.1. A paritás definíciója	142
36.2. Kapcsolat a pályaimpulzusmomentummal	143
37. Centrális erőter, radiális egyenlet	145
38. A radiális egyenlet megoldásainak aszimptotikus viselkedése	147
38.1. Aszimptotikus viselkedés $r \rightarrow \infty$ esetén	147
38.2. Aszimptotikus viselkedés a 0 környezetében	147
39. Coulomb-potenciál kötött állapotai	148
40. A H-atom spektruma	150
41. Több részecske rendszerek és azonos részecskék	157
42. Független részecskék	162
42.1. Azonos független részecskék alapállapotai	163
43. Többelektronos atomok	165

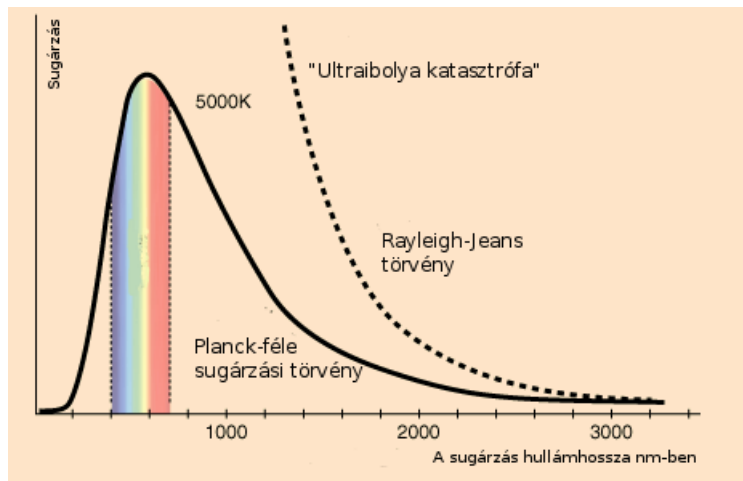
I. rész

1. Az üregsugárzás törvényei

1.1. A Wien-féle eltolódási törvény és a Stefan-Boltzmann törvény

Egy zárt, belül üres fémdoboz kis nyílása az úgynevezett abszolút fekete test. A nyílás elektromágneses sugárzást bocsát ki, amely különböző hullámhosszúságú komponenseket tartalmaz. Ha a fémdobozt hevítjük, akkor elegendő magas hőmérsékleten ezt a sugárzást látható fényként is észlelhetjük. A kibocsátott sugárzás (fény) energiájának a hullámhossz vagy (frekvencia) szerinti folytonos eloszlását az üreg, azaz a fekete test spektrumának nevezzük.

FEKETE TEST HŐMÉRSÉKLETI SUGÁRZÁSA		
		Ezen a java animáción a fekete test által kibocsátott sugárzás spektrumának hőmérsékletfüggését tanulmányozhatjuk.



1. ábra. A fekete test által kisugárzott intenzitás hullámhossz szerinti eloszlása

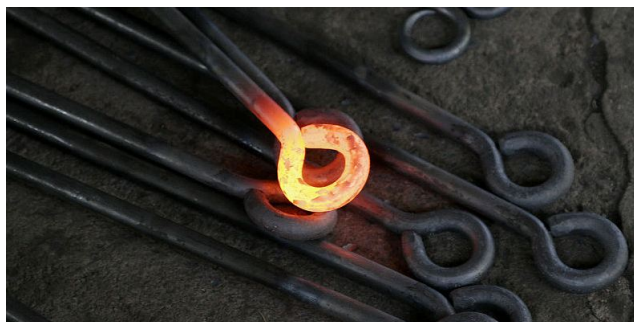
Az üreg által T hőmérsékleten kibocsátott sugárzás spektrumában, (amelynek alakját a fenti ábra mutatja) a λ hullámhossztól való függés maximumának helyét a Wien-féle eltolódási törvény határozza meg:

$$\lambda_{\max} T = b = 2,9 \times 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K} = 2,9 \times 10^6 \text{ nm} \cdot \text{K}. \quad (1.1)$$

A teljes kisugárzott teljesítményt a Stefan-Boltzmann-féle törvény adja meg

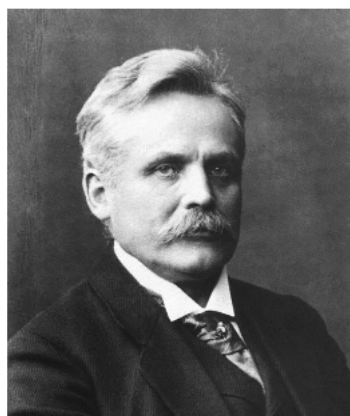
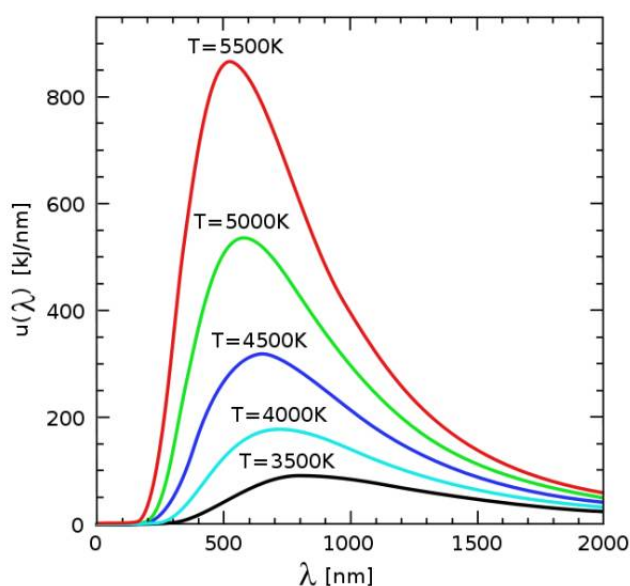
$$P = \sigma A T^4, \quad (1.2)$$

ahol $\sigma = 5,67 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2 \text{ K}^4$ egy állandó, A pedig a sugárzó felülete.



2. ábra. Forró fém egy kovácsműhelyből. A narancsos izzás a hőmérsékleti sugárzás látható hullámhossz tartományba eső része.

Ez a törvény jó közelítéssel érvényes számos olyan test (tehát nem csak egy üreg) esetében is, amikor az a hőmérséklete miatt sugároz. A hőmérsékleti sugárzás akkor lép föl, amikor a test energiája nagyszámú belső szabadsági foka között oszlik meg, és ez az energia elektromágneses hullámok formájában elhagyja a testet. Ilyen hőmérsékleti sugárzó pl. egy wolframizzó, a Nap, vagy a csillagok.



Wilhelm Wien (1864-1928)
Nobel díj 1911

3. ábra. A grafikonon a fekete test által kisugárzott intenzitás hullámhossz szerinti eloszlása látható különböző hőmérsékleten. A görbék maximumhelye a Wien-féle eltolódási törvényt követve változik.

1.1 Feladat: Mennyi energiát sugároz ki másodpercenként egy tízforintos érme szobahőmérsékleten (20°C-on)? A méreteit mérjük meg!

1.2 Feladat: Mekkora térfogatú levegőnek van ennyi belső energiája?

1.2. A hullámhossz szerinti eloszlás magyarázata

Az üregben elektromágneses állóhullámok alakulnak ki. Egy ilyen, adott hullámhosszú állóhullámot hullámmódusnak vagy csak egyszerűen *módusnak* nevezünk. A módus jellemzésére a λ hullámhossz



Jozef Stefan 1879
megmérte



Ludwig Boltzmann, 1884
kiszámította

4. ábra.

helyett gyakran a ν frekvenciát használjuk:

$$\nu = \frac{c}{\lambda} (= f). \quad (1.3)$$

Megjegyezzük, hogy ha nem vákuumban, hanem valamilyen közegben tekintünk egy ilyen hullámot a ν ugyanaz, λ viszont változik. Ha a közegben a fény fázissebessége c_k , akkor a hullámhossz:

$$\lambda = \frac{c_k}{\nu}. \quad (1.4)$$

Egy további mennyiség a módus jellemzésére annak körfrekvenciája:

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi c}{\lambda} = kc. \quad (1.5)$$

Itt a $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ mennyiséget a módus hullámszámának nevezzük.

A frekvencia vagy a körfrekvencia megadása azonban nem jellemzi a módot egyértelműen, sok ugyanolyan frekvenciájú módus lehetséges attól függően, hogy milyen irányban alakul ki az állóhullám.

Vizsgáljuk meg, hogy hogyan függ az üregben lévő elektromágneses energia térfogati sűrűsége a ν frekvenciától. Az első lépésben Lord Rayleigh elgondolását követjük, aki a 19. sz. legvégén föltette, hogy egy-egy *módus*, azaz egy elektromágneses *állóhullám*, tulajdonképpen egy harmonikus rezgést végző objektum, azaz egy harmonikus oszcillátor. Valóban, egy állóhullámot kiválasztva, abban az elektromos és a mágneses mező az adott frekvenciával harmonikus rezgőmozgást végez. A rezgéshez tartozó energia két részből, az elektromos és a mágneses mező energiájából áll össze, hasonlóan ahhoz, ahogyan egy mechanikai oszcillátor (egy rugón rezgő test) energiája is két részből áll, a mozgási és a rugalmas energiából. Az üregben lévő teljes energia az egyes módusok energiájának összege. Ahhoz, hogy ezt kiszámítsuk két dologra van szükség. Meg kell adni, hogy egy oszcillátornak, azaz egy módusnak mennyi az energiája és hogy hány módus van az üregben. Ez utóbbiak száma függ az üreg térfogatától. Az *egységnyi térfogatban* és $d\nu$ frekvenciaintervallumon a módusok száma (amelyet itt számítás nélkül közlünk):

$$g(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} d\nu. \quad (1.6)$$

A V térfogatú üregben a módusok száma $g(\nu)V$, a számítás részletei a statisztikus fizikai, illetve a kvantumoptikai könyvekben találhatók meg.

Az egyes módusok energiája általában különböző és ezért az energia értékének eloszlását, vagy annak csak az átlagát tudjuk megmondani. A módusok érintkezésben vannak az üreg falával, azon keresztül egymásnak energiát adhatnak át, és így hőmérsékleti egyensúlyba kerülnek. Az átlagos energiát az elemi statisztikus fizikából ismert módon adta meg Rayleigh. Eszerint hőmérsékleti egyensúlyban, adott T hőmérsékleten egyetlen oszcillátormódusra, amely két szabadsági fokkal, – jelen esetben egy elektromos és egy mágneses szabadsági fokkal – és az ezekben tárolt energiával bír

$$\bar{\varepsilon} = k_B T \quad (1.7)$$

energia jut átlagosan (ekvipartíció törvénye), ahol k_B a Boltzmann állandó:

$$k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K}. \quad (1.8)$$

A fentiekből a mező energiasűrűsége (energia/térfogat) a $d\nu$ frekvenciaintervallumon:

$$u_R(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T d\nu. \quad (1.9)$$

Ennek az összefüggésnek a neve Rayleigh-Jeans-törvény, amely azonban a kísérletek szerint csak viszonylag alacsony frekvenciákon bizonyult helyesnek. Látható, hogy a függés adott T -nél a ν monoton (négyzetesen) növekvő függvénye, míg a kísérletek szerint ez a függvény egy ponton maximumot ér el (ennek helyét szabja meg a Wien-féle eltolódási törvény), majd megfordul és közelítőleg exponenciálisan csökkenni kezd. Ezt az ellentmondást "ultraibolya katasztrófának" szokás nevezni, mert a ν^2 -el arányosan növekvő energiasűrűség elvileg is lehetetlen. A teljes energiasűrűség ugyanis az összes frekvenciára vett energiasűrűség integrálja: $\int_0^\infty u_R(\nu)d\nu$, ami a ν^2 -es függés miatt végtelen nagynak adódik. A Rayleigh-féle gondolatmenet tehát valahol téves.

Planck rájött (1900), hogy ha fölteszi, hogy az egyes állóhullámok (oszcillátorok) az energiát csak diszkrét adagokban, ún. *kvantumokban* adhatják át egymásnak, s ezen adagok nagysága egy ν frekvenciájú rezgés esetén

$$\varepsilon = h\nu, \quad (1.10)$$

ahol h egy állandó (Planck-állandó), akkor a probléma kiküszöbölhető. Ez esetben ugyanis az ekvipartíció $\bar{\varepsilon} = k_B T$ törvénye már nem lesz érvényes, aminek az az oka, hogy ha a $h\nu$ energiaadag jóval nagyobb mint az átlagosnak gondolt $k_B T$, akkor azt az adagot az oszcillátor egyáltalán nem tudja fölvenni. Levezethető, hogy a fenti kvantumos föltételezés esetén egy oszcillátorra átlagosan

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1} h\nu \quad (1.11)$$

energia jut.

Ebből az üregsugárzás energiasűrűsége:

$$u_P(\nu)d\nu = g(\nu)\bar{\varepsilon}d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} d\nu. \quad (1.12)$$

Az üregből a kis lyukon kilépő sugárzás teljesítménye hullámhossz- illetve frekvenciafüggését is ez a formula szabja meg, mert az üregből kisugárzott intenzitás az üregben lévő energiával arányos. A felületegységen időegység alatt átsugárzott energia, másnéven teljesítménysűrűség

$$I(\nu, T) = \frac{c}{4} u_P(\nu) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}, \quad (1.13)$$

ahol a $c/4$ együttható geometriai megfontolásokból következik. Ez a Planck-féle sugárzási törvény.

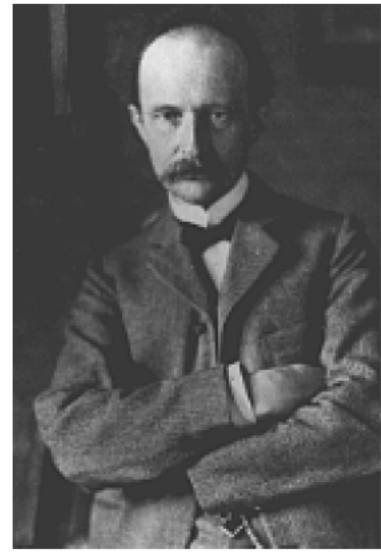
Max Planck 1858-1947



1878



1901



1925

1918 évi Nobel díj 1919

5. ábra.

Lummer, Pringsheim és Rubens az üreghullámok spektrumának kísérleti görbéivel összehasonlítva azt találták, hogy a függvény menete tökéletesen egyezett a fönti képlettel. A mérési eredményekkel összevetve Planck meg tudta határozni a h állandó nagyságát, melynek mai értéke:

$$h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ Js.}$$

A fönti képletek részletesebb levezetésére ld. pl. Hevesi, Szatmári: Bevezetés az Atomfizikába, vagy <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/mod6.html>

1.3 Feladat: Az elméleti fizikában a rezgések és hullámok leírásánál a frekvencia helyett gyakran a körfrekvenciát használjuk, melynek definíciója $\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi c}{\lambda} = kc$. Írjuk föl az energiasűrűséget ν helyett ω -val, azaz adjuk meg $u(\omega)d\omega$ -t (majdnem triviális) és használjuk itt a szokásos

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

jelölést. $\hbar$ értéke:

$$\hbar = 1,06 \times 10^{-34} \text{ Js.}$$

1.4 Feladat: Írjuk föl az energiasűrűséget ν helyett λ -val, azaz adjuk meg $u(\lambda)d\lambda$ -t. Ez egy kissé kevésbé triviális.

1.5 Feladat: Mutassuk meg, hogy kis frekvenciákon a Planck-törvényből visszkapjuk a Rayleigh-Jeans-törvényt. Mit jelent kvantitatíve (mennyiségileg) a "kis" frekvencia?

1.6 Feladat: Milyen törvény szerint változik közelítőleg "nagy" frekvenciákon az energiasűrűség? Ez utóbbit nevezzük Wien-féle sugárzási törvénynek, amelyet Wien még Planck előtt talált termodinamikai megfontolásokból.

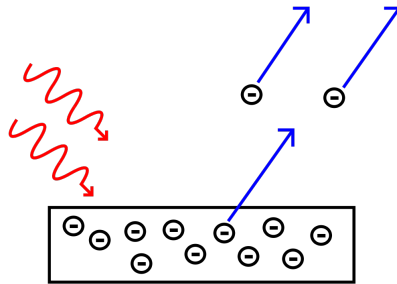
1.7 Feladat: Vezessük le a Wien-féle eltolódási törvényt, az 1.4 Feladatban kapott eredményből, azaz

számítsuk ki az $u(\lambda)$ függvény maximumának helyét, és számítsuk ki a b állandót.

1.8 Feladat: Vezessük le a Stefan-Boltzmann-törvényt, a Planck-törvény $I(\nu)$ -re vonatkozó alakjának frekvencia szerinti integrálásával. Itt használjuk az $\int_0^\infty \xi^3 (e^\xi - 1)^{-1} d\xi = \frac{\pi^4}{15}$ integrálformulát. Határozzuk meg ennek alapján a Stefan-Boltzmann állandót.

2. A fotonhipotézis, a fény részecske természete

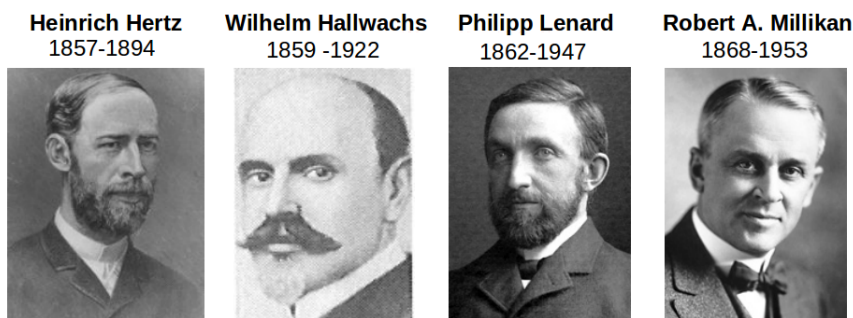
2.1. A fotoeffektus vagy fényelektromos hatás



6. ábra. A fényelektromos hatás sematikus ábrája

Fém felületét fénnel megvilágítva, a fémből negatív töltésű részecskék, elektronok lépnek ki, ezeket fotoelektronoknak nevezzük. A jelenséget Hallwachs és Stoletov fedezte föl, majd Herz, Lenard és Millikan tanulmányozta igen alapos kísérletekkel. Ennek nyomán megállapították, hogy

- A kilépő fotoelektron energiája csak a fény frekvenciájától függ, az intenzitásától nem
- A kilépő fotoelektronok száma arányos a fény intenzitásával
- Nincs mérhető időkéés a felület besugárzása és az elektron kilépése között



7. ábra.

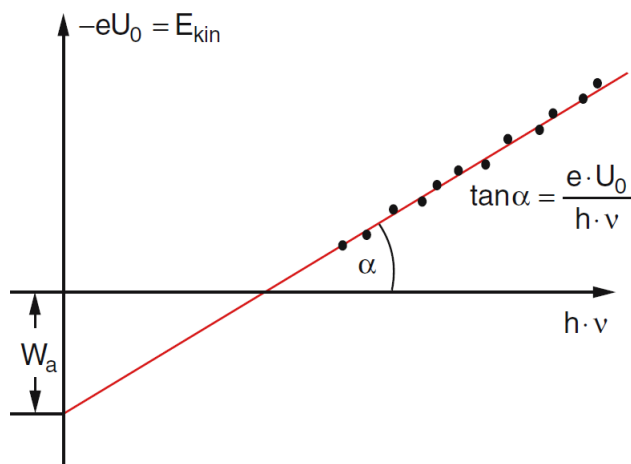
A fenti megfigyeléseket Einstein azzal magyarázta, hogy az elektronok a beérkező fényből az energiát adagokban, kvantumokban nyelik el. Egy fénykvantum energiája a Planck-féle gondolat nyomán

$$\varepsilon = h\nu, \quad (2.1)$$

ahol ν a fény frekvenciája, h a Planck-állandó. A $\hbar = h/2\pi$ jelöléssel és az $\omega = 2\pi\nu$ körfrekvenciával ez a képlet az elméleti fizikában használatosabb

$$\varepsilon = \hbar\omega \quad (2.2)$$

alakba is írható. A fénykvantum később a foton nevet kapta.

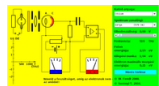


8. ábra. A fotoeffektus során kilépő elektronok mozgási energiája a fémfelületet megvilágító fény frekvenciájának függvényében. A küszb frekvenciának megfelelő foton energia ott van, ahol az egyenes a vízszintes tengelyt metszi.

A kilépő elektronok mozgási energiájára a következő összefüggés ("fényelektromos egyenlet") érvényes:

$$E_{\text{kin}} = h\nu - W_a \quad (2.3)$$

ahol W_a – amelyet kilépési munkának szokás nevezni – az elektronnak a fém belsejéből való kiszakításához szükséges energiamennyiség, a fémre jellemző érték. Ha $h\nu$ kisebb, mint W_a , akkor nincs elektronkilépés. Alkáli fémek pl. Na, Cs esetén a látható fény is alkalmas elektronok kiszakítására, a legtöbb fém esetén azonban a $h\nu_h = W_a$ egyenlőségnek megfelelő határfrekvencia az ultraibolya tartományba esik. Az E_{kin} értékét azzal az U_0 ellenfeszültség értékkel lehet meghatározni, amely már éppen nem engedi eljutni az elektront egy elektródarácsra. A fényelektromos egyenletet a ν függvényében mért U_0 értékeket ábrázolva lehet igazolni.

FÉNYELEKTROMOS HATÁS		
		Ezzel a szimulációval a fényelektromos hatást vizsgálhatjuk, és olyan virtuális kísérletet végezhetünk, mellyel a Planck-állandó és a kilépési munka meghatározható.

2.1 Feladat: A fotoeffektust egy cézium bevonatú fotocellával vizsgálva 546 nm hullámhosszúságú fény esetén az elektronok 0,33 V ellenfeszültséggel állíthatók meg, míg 365 nm hullámhosszúságú fényt használva ez az érték 1,46 V.

Mennyinek adódik a Planck-állandó értéke ezekből a mérésekből, és mennyi a cézium kilépési munkája?

Mekkora lesz az elektronok megállításához szükséges ellenfeszültség, ha a fotoeffektust 436 nm hullámhosszúságú fénnel vizsgáljuk? Mekkora az a határhullámhossz, ameddig van elektronkilépés?

2.2 Feladat: Becsüljük meg a villanyszámla alapján, hogy mennyit fizetünk egy 5%-os hatásfokú 100W-os égő 1 másodperces bekapcsolása során egy zöld fotonért.

2.2. A foton impulzusa

Einstein a fotonokhoz impulzust is rendelt. A ν frekvenciájú, tehát vákuumban $\lambda = c/\nu$ hullámhosszúságú foton impulzusa

$$\mathbf{p} = \frac{h\nu}{c} \hat{\mathbf{k}} = \frac{h}{\lambda} \hat{\mathbf{k}} = \hbar \mathbf{k}, \quad (2.4)$$

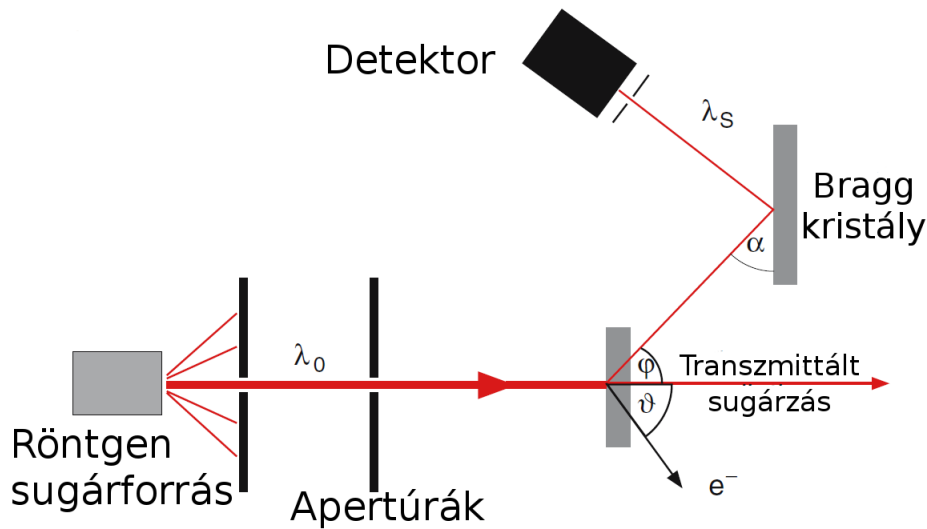
ahol $\hat{\mathbf{k}}$ a monokromatikus síkhullámnak tekintett fényhullám terjedési irányába mutató egységvektor, $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{k}}$ pedig a fénny hullámszámvektorának nevezett mennyiség, melynek nagysága $k = 2\pi/\lambda$. $\mathbf{p}$ fönti alakja összhangban van a tetszőleges m_0 (nyugalmi) tömegű szabad részecske esetére vonatkozó

$$E^2/c^2 - p^2 = (m_0c)^2 \quad (2.5)$$

képlettel, ha a foton esetére érvényes $m_0 = 0$ kikötést tesszük.

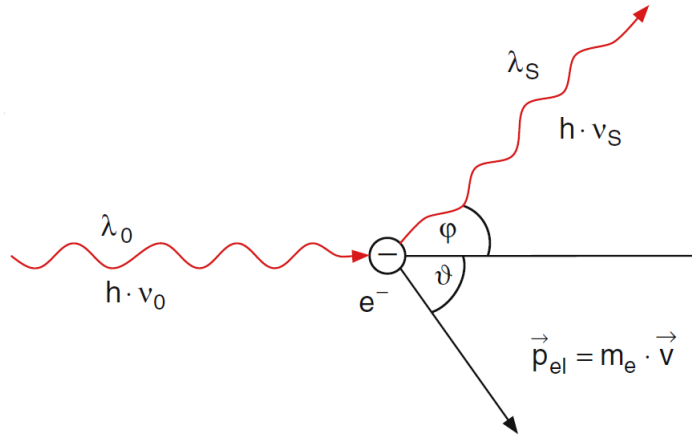
2.3. A Compton-effektus

A fotonhipotézis számos bizonyítéka közül igen fontos az A. Compton kísérletei nyomán Compton-effektusnak nevezett jelenség, amelyet az alábbi ábra vázol.



9. ábra.

λ_0 hullámhosszúságú röntgensugarat bocsátunk egy mintára, ahonnan az elektronokat lök ki, miközben másodlagos, szórt röntgensugárzás keletkezik, melynek iránya és hullámhossza is megváltozik. Ez utóbbiakat a fönti elrendezéssel mérni lehet.



10. ábra. A Compton-effektus sematikus ábrája: a ball oldalról érkező röntgen foton szóródik a minta egy elektronján.

A szórt röntgensugár hullámhossza legyen λ_s . A jelenséget a foton és az elektron, mint klasszikus pontszerű objektum ütközésének tekintve az energia- és impulzusmegmaradásból az (10) ábrának megfelelően a következő egyenletek írhatók föl:

$$h\nu_0 + E_0 = h\nu_s + E_e, \quad (2.6a)$$

$$\frac{h\nu_0}{c} = \frac{h\nu_s}{c} \cos \varphi + p_e \cos \vartheta, \quad (2.6b)$$

$$0 = \frac{h\nu_s}{c} \sin \varphi - p_e \sin \vartheta. \quad (2.6c)$$

Itt $E_0 = m_e c^2$ a kezdetben nyugvó elektron energiája. E_e és p_e pedig az elektron ütközés utáni energiája, illetve impulzusának nagysága:

$$E_e = \frac{m_e c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad p_e = \frac{m_e v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}. \quad (2.7)$$

A fenti három egyenletből némi matematikával a

$$\lambda_s - \lambda_0 = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \varphi) \quad (2.8)$$

egyenlőség vezethető le. (Az elektronoknak a minta atomjaiban valójában egy kis kötési energiája is van kezdetben, de ennek nagysága elhanyagolható az itt szereplő többi energia mellett, ezért a kezdeti elektron energiáját nullának, illetve relativisztikus esetben $m_e c^2$ -nek vehetjük.) Ez a képlet összefüggést teremt a röntgenfotonnak a szórás során bekövetkező hullámhosszváltozása és a φ szórási szög között. A képletet Compton kísérletei pontosan igazolták. A

$$\lambda_C = \frac{h}{m_e c} = 2,43 \times 10^{-12} \text{m} \quad (2.9)$$

hosszúságot az elektron Compton-hullámhosszának szokás nevezni. Ekkora a hullámhosszváltozás a $\varphi = \pi/2$ -nek megfelelő derékszögű szórás esetén. Megjegyezzük, hogy néha a $\tilde{\lambda}_C = \frac{\hbar}{m_e c} = \lambda_C/2\pi$ értéket nevezik Compton-hullámhossznak.

COMPTON-EFFEKTUS		
		Tanulmányozzuk a Compton-effektust a bal oldali linken található java animációval, és válaszoljuk meg az ottani tesztkérdéseket.

2.3 Feladat: Vezessük le a Compton-effektus során a hullámhosszváltozásra vonatkozó formulát az elektron energiájának és impulzusának klasszikus alakjával.

2.4 Feladat: Vezessük le ugyanezt a relativisztikus energia és impulzus képletét használva.

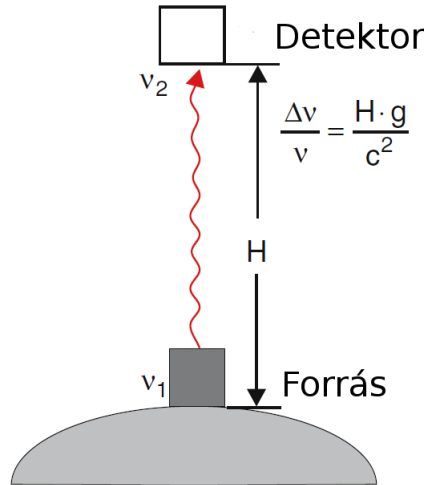
A kísérletek tehát azt mutatják, hogy az elektromágneses mező bizonyos értelemben diszkrét természetű, adott frekvenciájú és irányú terjedés esetén, a fenti formuláknak megfelelő energiával és impulzussal rendelkező részecskeként hat kölcsön az atomos anyaggal.

2.4. A gravitációs vöröseltolódás

A foton energiájának $h\nu$ képletével is interpretálható egy további híres kísérlet, amelynek során Pound, Rebka és Snider az ún. gravitációs vöröseltolódást 1959-ben, majd később 1965-ben még pontosabban kimutatták. Egy torony aljában elhelyezett radioaktív vasizotópból származó gamma sugár fotonjainak frekvenciaváltozását mérték, mialatt azok a torony tetején ℓ magasságban elhelyezett detektort elérték. Mivel a foton a Föld nehézségi erőterében följebb kerül, potenciális energiája nagyobb lesz, ezért frekvenciájának csökkennie kell (tehát a "vörös" irányában eltolódik), hogy a teljes energiája állandó maradjon. Az energiaváltozásra így fönnáll a $h(\nu_0 - \nu_\ell) = (h\nu/c^2)g\ell$ összefüggés, ahol ν a foton közepes frekvenciája és $h\nu/c^2$ a mozgó foton tömege. Ebből a relatív frekvenciaváltozás:

$$\frac{\nu_0 - \nu_\ell}{\nu} = \frac{\ell g}{c^2}. \quad (2.10)$$

A 22,5 m magas toronyban ezt a frekvenciaváltozást a Mössbauer-effektus segítségével sikerült kimutatni, illetve a pontosságot oly módon is növelni, hogy a forrás és a detektor helyét megcserélték. Az eredmény azonban szigorúan véve nem kvantumos jelenség, a h Planck-állandó ugyanis nem szerepel benne.



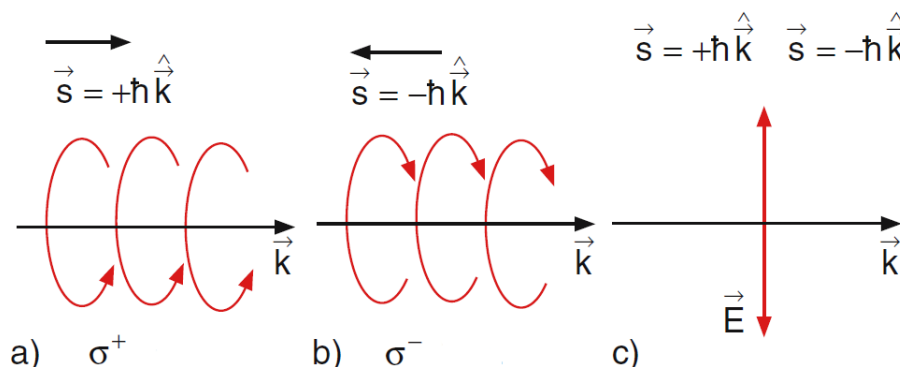
11. ábra. Kísérleti elrendezés a vöröseltolódás mérésére

2.5. A foton impulzusnyomatéka

A fotonok energia és impulzus mellett impulzusnyomatékkal, perdülettel is rendelkeznek. A kísérletek szerint, ha egy atom fotont nyel el, akkor az impulzusnyomatéka is megváltozik. Elméleti és kísérleti eredmények szerint a cirkulárisan poláros fényben egy foton impulzusnyomatéka, amelyet ez esetben spinnek is szokás nevezni

$$\mathbf{S} = \pm \hbar \frac{\mathbf{k}}{k}. \quad (2.11)$$

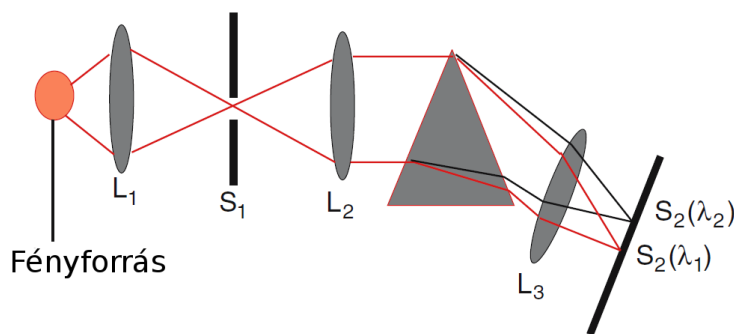
Nagysága tehát $\hbar$, és vagy a terjedés irányába, vagy azzal ellentétes irányba mutat. A + előjel esetén σ^+ állapotú, pozitív helicitású (a régebbi irodalomban balra, az újabb könyvekben jobbra cirkulárisan polarizált) fotonról beszélünk, a – előjel esetén negatív helicitású fotonról van szó.



12. ábra. Pozitív helicitású, negatív helicitású és lineárisan polarizált fény

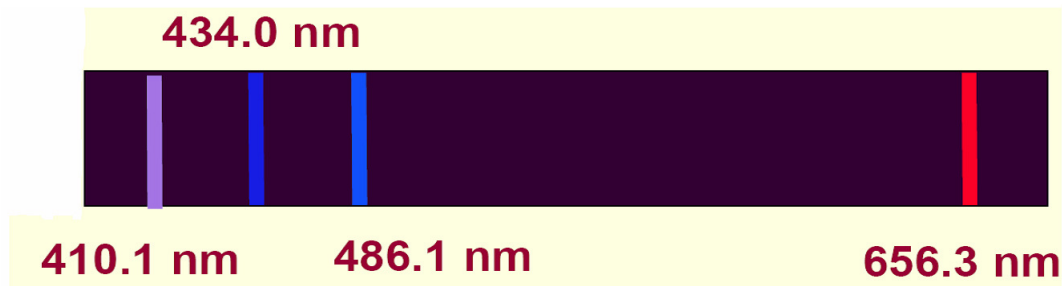
A lineárisan polarizált, (π polarizációjúnak is nevezett) fényben a foton az előző két állapot kvantummechanikai szuperpozíciójában van. Ennek az utóbbi kijelentésnek a következő fejezetekben tárgyalandó mélyebb elmélet ad majd értelmet.

3. Atomok vonalas színe, a Bohr-féle posztulátumok és a hidrogénatom Bohr-modellje



13. ábra. Spektrográf: a különböző hullámhosszúságú komponensek

A színeképlelemzés a 19. század közepén fölfedte, hogy az egyes anyagok gáz halmazállapotban kisugárzott fénye csak bizonyos jól meghatározott hullámhosszúságú komponenseket tartalmaz, szemben a korábban tárgyalt üreghullámterjesztéssel, ahol a kisugárzott fényben minden hullámhossz megjelenik. Az előforduló hullámhosszakokat azok intenzitásával együtt az adott anyag színeképének, spektrumának nevezzük. (A spektrum szót ettől különböző értelemben fogjuk használni később a kvantummechanikában.) Mi a magyarázata ennek a diszkrét színeképnek, és hogyan lehetne megérteni, hogy mely hullámhosszakon történik a fénykibocsátás? Illusztrációként alább láthatjuk a legegyszerűbb (a legkönnyebb) atom a hidrogén spektrumának a látható tartományba eső részét, amelyet egy búrba zárt ritka hidrogéngáz bocsát ki, ha a gázon át elektromos kisülést hozunk létre.



14. ábra. A H-atom spektruma a látható tartományban, a Balmer-sorozat

A spektrumvonalak hullámhosszára Balmer a következő képletet találta próbálgatással:

$$\lambda = B \left(\frac{n^2}{n^2 - 4} \right) \quad n = 3, 4, \dots, \text{ ahol } B = 3645,6 \times 10^{-8} \text{ cm.} \quad (3.1)$$

Később további vonalsorozatokat figyeltek meg: a Lyman-sorozat az ultraibolyában, a Paschen-, Brackett-, stb. sorozatok az infravörösben vannak. Mindezekre Rydberg a Balmer-képlet általánosításaként az

$$\frac{1}{\lambda} \equiv \bar{\nu} = R_H \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad R_H = 1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1} \quad (3.2)$$

képletet találta, ahol a Lyman-sorozatra $k = 1$, a Balmer-sorozatra $k = 2$, stb. és $n = k+1, k+2, \dots$

3.1 Feladat: Mutassuk meg, hogy a Balmer-képlet a Rydberg-félenek speciális esete, és számítsuk ki B-t az R_H segítségével.

3.2 Feladat: A fenti 14. ábrán látható a vörös – úgynevezett H_α – Balmer vonal hullámhossza. Ennek alapján számítsuk ki az első, legnagyobb hullámhosszú ún. Lyman- α vonal hullámhosszát a Rydberg-állandó felhasználása nélkül. A Lyman-sorozat az alapállapotnak nevezett legmélyebb energiájú állapotba való átmenetek során keletkezik.

3.3 Feladat: A spektroszkópusok észrevették, hogy a Balmer-sorozat további vonalai egyre sűrűbben követik egymást. Milyen hullámhosszhoz tartanak (torlódási pont) a Balmer-sorozat vonalai?

A diszkrét spektrumvonalak föllépésének magyarázatához idézzük föl, amit az atomok szerkezetéről tanultunk. Az atomok tulajdonságainak megismerésében alapvető szerepet játszott a Rutherford féle szórási kísérlet, amelyben egy vékony aranyfóliát pozitív töltésű α -részecskékkel (He-atom magjaival) bombáztak. A részecskék túlnyomó többsége irányváltoztatás nélkül áthaladt a fólián, egy kisebb hányaduk különböző irányokba eltért. A nagyobb szögben eltérülő részecskék száma a szög növekedésével erősen csökkent. Ennek segítségével Rutherford bizonyította, hogy a körülbelül 10^{-10} m sugarú gömbszerűnek gondolt atomok egy pozitív töltésű magból és a mag körül keringő negatív töltésű elektronokból állnak, de a mag mérete az egész atom méretének csupán 10^{-5} -szerese, és ebben a magban koncentrálódik az atom tömegének túlnyomó része. Ez magyarázza, hogy a bombázó α -részecskék közül csak azok térültek el lényegesen, amelyek a mag közelébe jutottak a szórás-kísérlet során. A kisméretű mag föltételezéséből Rutherford levezette, hogy az eredeti iránytól θ szöggel eltérített atomok száma $1/\sin^4 \theta$ -val arányos, s ez a kísérletekkel összhangban volt. Ez a Rutherford-féle modell magyarázta a szórás-kísérlet eredményét, de más szempontból nyilvánvaló hiányosságot mutatott.

Nem érthető meg ugyanis ebben a modellben az atomok stabilitása, mert a pozitív mag körül keringő elektron gyorsul, hiszen a mag felé mutató centripetális gyorsulása van. Viszont az elektrodinamika általános elvei szerint egy gyorsuló töltés elektromágneses mezőt sugároz, s emiatt energiát veszít. Ezen alapszik pl. az, hogy egy TV adó sugároz, ugyanis az antennájában rezgőmozgást – tehát gyorsuló mozgást – végző elektronok mozognak. Hasonlóan sugárzást bocsátanak ki a

körpályán mozgó töltések is. Ezen az elven működnek az úgynevezett szinkrotronok, amelyekben mágnesekkel kényszerítik körpályára a fénysebességhez közeli sebességgel mozgó elektronokat, és az általuk kibocsátott sugárzást anyagvizsgálati célokra használják. A szinkrotronban csakúgy, mint a TV adókban a kisugárzott energiát az elektronok elveszítik, persze ezt a veszteséget az ilyen berendezésekben külső forrásból pótolják. Az elektrodinamika szerint ugyanígy sugározni kellene az atomban körpályán mozgó elektronnak is. A számítások szerint ez ahhoz vezetne, hogy az elektron nagyon gyorsan elveszítené az energiáját, ami miatt a magba kellene hullania, és az atom nem is létezne. Egy másik probléma, hogy ebben az esetben a kisugárzott mező ω körfrekvenciája alapvetően a körpálya szögsebességével egyezne meg, és így nem kapunk magyarázatot az atomoknál megfigyelhető vonalas szerkezetre.

3.1. A Bohr-féle posztulátumok

A fent jelzett problémák kiküszöbölésére Bohr két posztulátumot fogalmazott meg.

1. *Az atomokban az elektronok elektromágneses energia sugárzása nélkül tartózkodhatnak úgynevezett stacionárius pályákon vagy stacionárius állapotokban. Ezen állapotok energiája nem lehet akármilyen, hanem csak meghatározott diszkrét értékű.*

2. *Az atom akkor sugároz, amikor az elektron állapota megváltozik, az elektron az E_1 energiájú stacionárius állapotból átkerül egy E_2 energiájú stacionárius állapotba és közben a*

$$h\nu = E_2 - E_1 \quad (3.3)$$

összefüggésnek megfelelő ν frekvenciájú fotont nyel el, ha $E_2 > E_1$, vagy a

$$h\nu = E_1 - E_2 \quad (3.4)$$

összefüggésnek megfelelő frekvenciájú fotont sugároz ki, ha $E_2 < E_1$.

Ezek a posztulátumok önmagukban nem érthetőek, mert ellentmondásban vannak a klasszikus elektrodinamika elveivel, és "ad hoc" jellegűek. Jelentőségük mégis igen nagy volt, mert később kiderült, hogy ezek a törvényszerűségek az "igazi" kvantummechanika fényében is helyesnek bizonyulnak. Ám nem alapvetőek, hanem lényegében következnek majd a kvantummechanika általános elveiből és formalizmusából.

3.2. A hidrogénatom Bohr-féle modellje

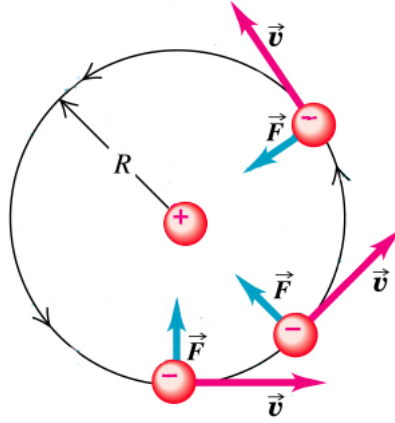
Kérdés azonban, hogy mi az a törvényszerűség, ami egy atom esetén kitünteti az 1. posztulátumban szereplő stacionárius állapotokat vagy a pályákat? Erre vonatkozóan a hidrogénatom esetén Bohrnak sikerült egy olyan kvantumföltételt megfogalmazni, amelyik helyesen adta vissza a H-atom spektrumát, ezt nevezzük a H-atom Bohr-féle modelljének. Tárgyaljuk most röviden ezt a modellt. A H-atomot úgy képzeljük, mint az elektronnál 1836-szor nagyobb tömegű pozitív töltésű magot és a körülötte keringő elektrontól álló rendszert, ahol az elektront a magtól származó Coulomb-erő vonzása egy r sugarú körpályán tartja.

Körpályát feltételezve tehát, a Newton-törvény szerint, a testre ható erő egyenlő a tömeg és a kör középpontja felé mutató $\frac{v^2}{r}$ gyorsulás szorzatával (a pálya valójában általában ellipszis, mert a Kepler-törvények érvényesek klasszikusan):

$$k \frac{q_e q_p}{r^2} \hat{\mathbf{r}} = -k \frac{q^2}{r^2} \hat{\mathbf{r}} = -m_e \frac{v^2}{r} \hat{\mathbf{r}}, \quad (3.5)$$

$$k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 9 \times 10^9 \frac{Nm^2}{C^2}, \quad (3.6)$$

ahol $\hat{\mathbf{r}}$ a magtól az elektron felé mutató egységvektor, $q_p = -q_e = 1,6 \times 10^{-19} C \equiv q_0$ a proton töltése, $m_e = 9,1 \times 10^{-31} kg$ az elektron tömege, míg $m_p = 1836 m_e$ a proton tömege.



15. ábra. Az elektront a magtól származó Coulomb-erő vonzása az egyszerűség kedvéért itt kör alakúnak feltételezett pályán tartja

Vezessük be az alábbi jelölést:

$$kq_0^2 = e_0^2, \quad (3.7)$$

ekkor a mozgásegyenlet $e_0^2/r^2 = m_e \frac{v^2}{r}$, amiből az elektron mozgási energiája:

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{1}{2} \frac{e_0^2}{r}. \quad (3.8)$$

Az elektron potenciális energiája a magtól r távolságra

$$E_{pot} = -\frac{e_0^2}{r}, \quad (3.9)$$

mert ennyi munkát kell végezni ahhoz, hogy az elektront a végtelenből a maghoz r távolságra hozzuk:

$$W = \int_{\infty}^r \mathbf{F} d\mathbf{r} = \int_{\infty}^r k \frac{q_e q_p}{r^2} \hat{\mathbf{r}} d\mathbf{r} = -\frac{e_0^2}{r} = E_{pot} \quad (\text{az integrációs úttól függetlenül}). \quad (3.10)$$

A teljes energia így:

$$E = E_{kin} + E_{pot} = -\frac{1}{2} \frac{e_0^2}{r} = -\frac{1}{2} m_e v^2 = -E_{kin} = \frac{E_{pot}}{2}. \quad (3.11)$$

Adjuk meg az elektron perdületét, másnéven impulzusnyomatékát is:

$$\tilde{\ell} := \mathbf{r} \times m_e \mathbf{v}. \quad (3.12)$$

Ennek centrális térben – tehát Coulomb térben – való megmaradásából következik Kepler 2. törvénye a bolygómozgás esetén. Ezek eddig teljesen klasszikus összefüggések. Az új, kvantumos elem a Bohr-féle modellben a következő. Bohr föltette, hogy a H-atomban csak azok a pályák megengedettek – ezek a stacionárius pályák – amelyekre az elektron perdülete a $\frac{h}{2\pi}$ egész számú többszöröse:

$$|\tilde{\ell}| = \ell = m_e r v = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3 \dots \quad (3.13)$$

Ebből kiszámítható, hogy a teljes energia

$$E = -\frac{1}{2} \frac{e_0^2}{r} = -\frac{1}{2} m_e v^2 = -\frac{1}{2} m_e \frac{n^2 \hbar^2}{m_e^2 r^2} \quad (3.14)$$

$$r_n = \frac{\hbar^2}{m_e e_0^2} n^2 = a_0 n^2. \quad (3.15)$$

Látható, hogy a pályasugarak diszkrét, és a

$$\frac{\hbar^2}{m_e e_0^2} = a_0 = 0,53 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (3.16)$$

úgynevezett Bohr-sugár, vagy első Bohr-sugár és a négyzetszámok szorzatai. Az eredményt visszatevé az energia fönti kifejezésébe, a stacionárius pályák energiáira is csak diszkrét értékek adódnak:

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{e_0^2}{r_n} = -\frac{m_e e_0^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{1}{n^2} \text{ Ry}, \quad (3.17)$$

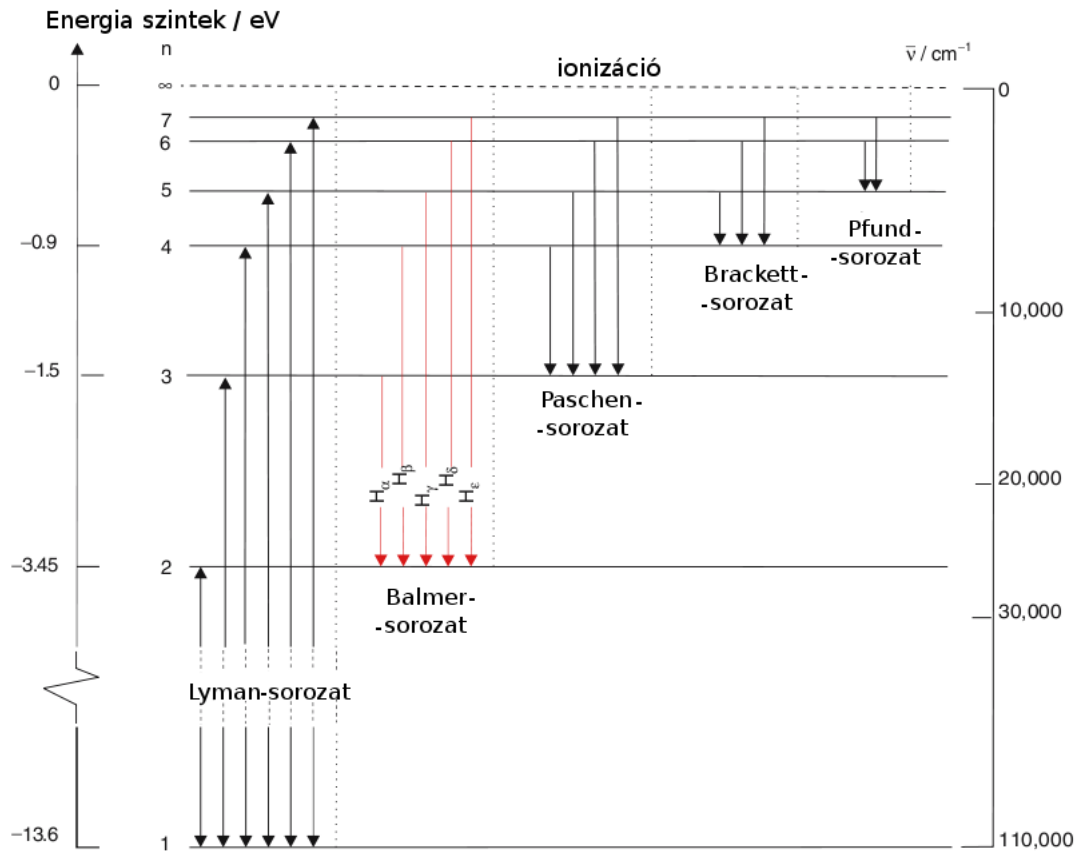
ahol a Rydberg

$$1 \text{ Ry} = 2,18 \times 10^{-18} \text{ J} = 2,2 \text{ aJ} = 13,6 \text{ eV} \quad (3.18)$$

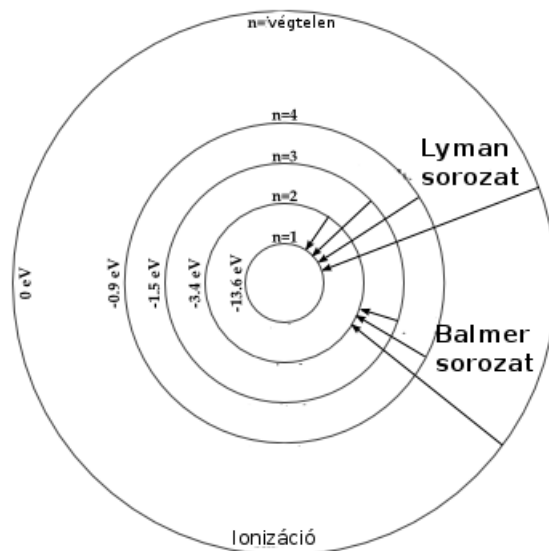
az atomfizikában gyakran használt energiaegység. A Bohr-féle 2. posztulátummal kiegészítve így a H-atom által kisugárzott, vagy elnyelt fény (elektromágneses hullám) frekvenciájára a

$$h\nu_{nk} = E_n - E_k = -\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right) \text{ Ry} \quad (3.19)$$

összefüggés adódik, a tapasztalattal Balmer, illetve Rydberg formuláival megegyezően.



16. ábra. Az egyes spektrumvonal-sorozatok keletkezésért felelős átmenetek



17. ábra. A lehetséges átmenetek a Lyman- és a Balmer-sorozat esetén

A H-ATOM BOHR-FÉLE MODELLJE		
		Ez az animáció szemléletesen magyarázza a H-atom spektrumvonalait a Bohr-modell alapján. Az animáció tartalmaz azonban bizonyos hibákat is, erre kérdez rá a 3.4 Feladat.

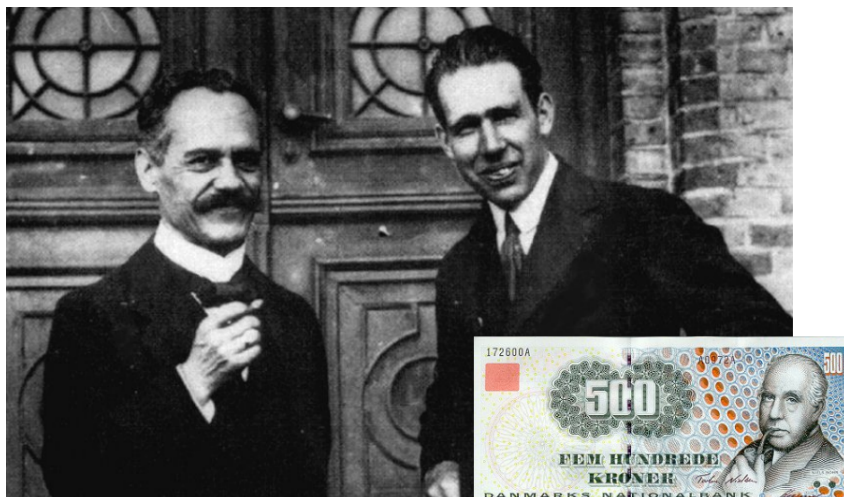
3.4 Feladat: Milyen hibák láthatók a fent idézett animáción?

3.5 Feladat: Számítsuk ki az elektron sebességét a Bohr-modell szerint az n -edik körpályán.

3.6 Feladat: A H-atom Bohr-modelljében szereplő tömeg valójában az elektron és a mag redukált tömege.

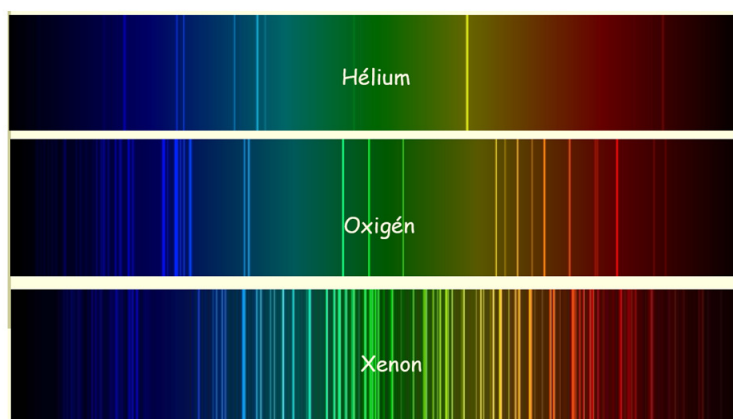
Mekkora ennek alapján a Lyman- α vonal hullámhosszának különbsége a deutérium (nehézhidrogén) és a hidrogén esetén? (Nézzünk utána, hogy mi a redukált tömeg, és mi a nehézhidrogén.)

A spektrumvonalaknak ezt az ún. elsődleges szerkezetét tehát a Bohr-féle modell jól visszaadja, de nem ad számot a H-atom spektrumának ún. finomszerkezetéről, amely egy nagyobb spektroszkópai fölbontás esetén észlelhető. Valójában ugyanis minden a Bohr-modellből kapott spektrumvonal több, egymáshoz közel eső, kissé különböző hullámhosszúságú vonalból áll. Ezt a tulajdonságot a Bohr-modell továbbfejlesztésével A. Sommerfeldnek sikerült megmagyaráznia.



18. ábra. Arnold Sommerfeld (1868-1951) és Niels Bohr (1885-1962). A jobb alsó sarokban egy dán bankjegy Bohr képével.

Ennek során a Kepler-féle pályákhoz hasonlóan Sommerfeld ellipszis pályákat is megengedett, újabb, a Bohr-féle $\ell = n\hbar$ kvantumföltételhez hasonló föltételeket írt elő, illetve a mozgó elektronra a relativisztikus mechanika képleteit alkalmazta, mely szerint pl. az elektron mozgási energiája $E_{kin} = m_e c^2 / \sqrt{1 - v^2/c^2} - m_e c^2$, stb.



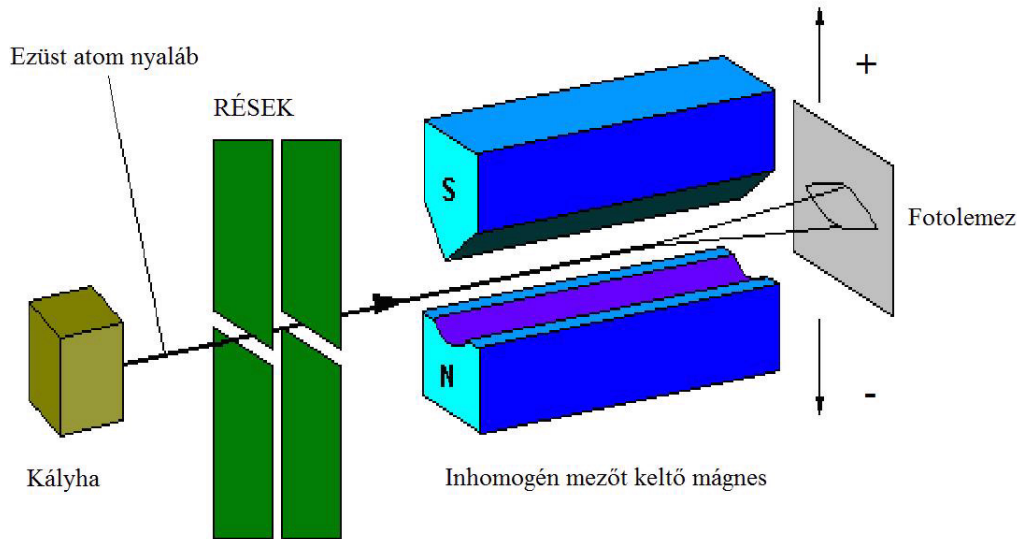
19. ábra. A He- az O- és a Xe-atom emissziós spektruma

Ezeket a meggondolásokat azonban nem tárgyaljuk tovább, mert ma már csak történelmi érdekességük van. A Bohr-Sommerfeld-féle megközelítést ugyanis nem sikerült kiterjeszteni a többi atomra, pl. már a He-atomra sem, ahol a mag körül már 2 elektron mozog, s így a H kivételével a többi atom spektrumát, amelyek közül néhányat a 19. ábrán láthatunk, nem sikerült megmagyarázni. Ennek oka, hogy a Bohr- és Sommerfeld-féle kiindulás csak annyiban helyes, hogy bizonyos fizikai mennyiségek értéke valóban csak diszkrét vagy diszkrét is lehet, emögött azonban sokkal szélesebb és mélyebb elvi okok állnak, mint az itt bemutatott, és az ahhoz hasonló lényegében önkényes kvantumföltételek. Az tehát csak véletlen, hogy a H-atomra kapott fönti eredmény helyes.

4. Feles spin és fotonpolarizáció

4.1. Stern-Gerlach berendezések

A kísérleti fizikából ismeretes a Stern-Gerlach-kísérlet. Egy kályhából ezüstatomok lépnek ki, majd egy kollimátor (szűrő és gyűjtő rések) után egy atomnyalábot kapunk, amely *inhomogén* mágneses mezőn halad keresztül. A tapasztalat szerint a mágneses mező hatására a nyaláb kettéválik. Az ezüstatomok elektromosan semlegesek, ezért az eltérülést nem a mágneses Lorentz-erő gyakorolja, homogén mágneses térben nincs is ilyen effektus. Az eltérülés oka az, hogy – mint kiderült – ezek az atomok mágneses dipólusmomentummal rendelkeznek, azaz úgy viselkednek, mint egy kis mágnesű vagy egy kis köráram. Az ilyen tulajdonságú részecskékre a $\mathbf{B}$ inhomogén mágneses mező $\mathbf{F} = -\text{grad}(\mu\mathbf{B})$ erőt gyakorol. Emiatt az ezüstatomok eltérülnek a berendezés mögött. A mágnesek kialakítása olyan, hogy $\mathbf{B}$ -nek csak az egyik komponense erős, legyen most ez a z irány, de ugyanakkor az változik is, tehát az erőnek lényegében csak z komponense van, amelynek nagysága $F = -\mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$. Az erő által okozott eltérülés arányos az erővel, tehát jelen esetben a mágneses dipólusmomentumnak a z komponensével.



20. ábra. A Stern-Gerlach-kísérlet vázlata. Itt a mágneses mező iránya lényegében fölfelé, a z irányba mutat, és a mező z komponensének gradiense is ugyanilyen irányú, a mágneses erővonalak az S pólus felé közeledve sűrűsödnek.

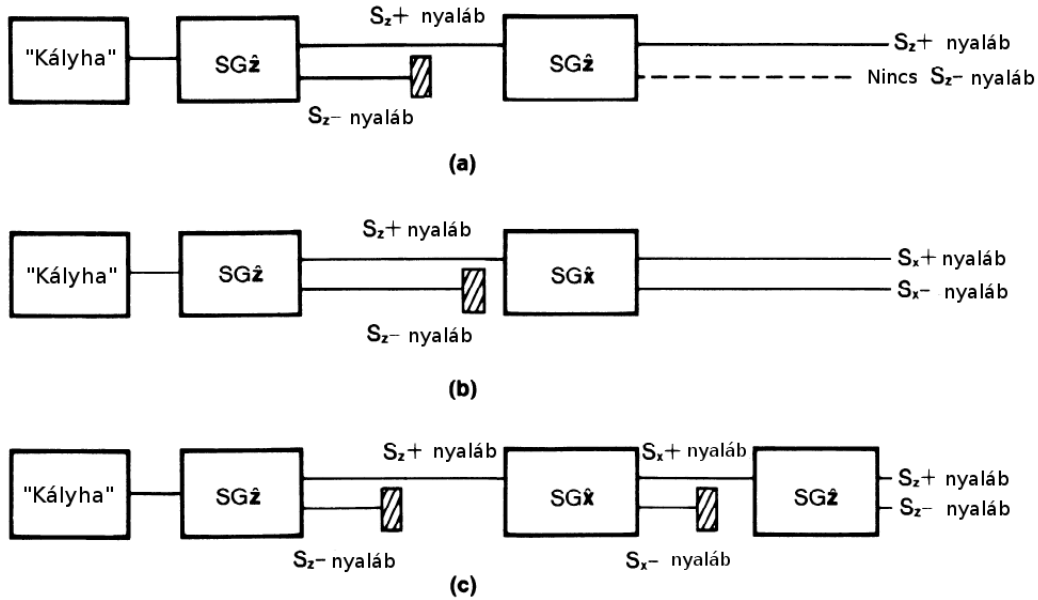
Azt gondolhatjuk, hogy a mágnesbe érkező atomok mágneses momentum vektorának az iránya akármilyen irányú is lehet a térben, s ennek megfelelően az egyes atomok mágneses momentumainak z komponensei tetszőleges nagyságúak lehetnek, tehát azt várjuk, hogy az ezüstatomok eltérülési iránya egy folytonos eloszlást követ. Ehelyett lényegében csak két egymástól jól elkülönülő irányban történik eltérülés, az atomnyaláb ketté válik. Ebből arra kell következtetnünk, hogy a mágneses momentum vektora a térben nem lehet tetszőleges irányú, hanem csak két különböző irányba megegyezett.

Ismert tény, hogy egy mágneses dipólusmomentum mindig mechanikai momentumhoz, perdülethez, azaz impulzusnyomatékhoz kapcsolódik, és azzal arányos:

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{S}, \quad (4.1)$$

ahol $\mathbf{S}$ a mechanikai impulzusnyomaték. Így $\mu_z = \gamma S_z$, és – megelőlegezve itt a későbbi eredményeket – kiderült, hogy a két nyaláb a kísérletek szerint olyan ezüstatomoknak felel meg, amelyek

impulzusnyomatékának z komponense $\hbar/2$, illetve $-\hbar/2$ értékű. A lényeges eredmény szempontunkból egyelőre az, hogy két kimenő csatorna van: ha az inhomogenitás fő irányát választjuk a z tengelynek, akkor a kijövő atomok $+z$ vagy $-z$ irányba térülnek el, amint az a 20. ábrán látható.

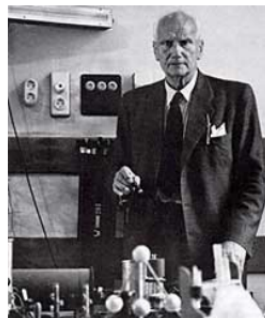


21. ábra. Stern-Gerlach berendezések egymás után

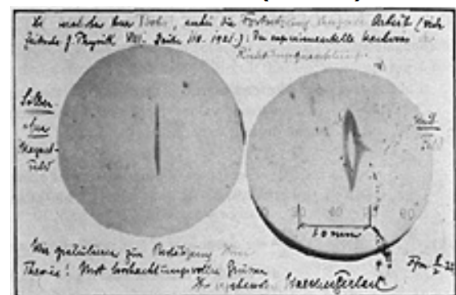
Takarjuk ki most az egyik kimenő nyalábot, mondjuk a $-z$ irányba eltérült, és helyezzünk el egy másik Stern-Gerlach berendezést az első után, amelynek az inhomogén tere ugyanolyan, (azaz z irányú) mint az elsőé. Ekkor ennek $-z$ -nek megfelelő kimenetén már nem jelentkeznek részecskék, ami érthetőnek látszik, hiszen azokat már kiszűrtük. Legyen azonban most a második berendezésünk olyan, hogy az inhomogén mágneses mező az előzőre merőleges $+x$ irányú. Ekkor azt tapasztaljuk, hogy az elsőből kijövő $+z$ típusú részecskék egyik fele a $+x$ másik fele a $-x$ irányba eltérülve jön ki. Ez nem meglepő, mert úgy gondoljuk, hogy a z szempontjából $+$ vagy $-$ irányba beállt részecskék az x irány szempontjából még lehetnek kétfélék. Tegyük azonban most egy harmadik berendezést is be, a második után, amelyben ismét z irányú a mágneses mező. Azt találjuk, hogy azon megint van $-z$ irányú eltérülés. Tehát ha a dolgot úgy képzeltük volna, hogy az első berendezés már kiszűrte a $-z$ irányú részecskéket, és azok már ezért nem jelentkeznek a harmadik berendezés után, az nem felel meg a valóságnak. Még meglepőbb a dolog, ha abból a helyzetből indulunk ki, hogy a két z irányú közül az egyiknek a $-z$ kimenetét takarjuk ki, a másiknak a $+z$ irányú kimenetét. Ha csak ez a kettő van egymás után elhelyezve, akkor nincs kilépő részecske. Ha viszont betesszük az x irányút a kettő közé, akkor megjelenik a harmadik után a $-z$ (és a $+z$ is). Úgy tűnik, hogy az x irányú berendezésen áthaladó részecskék elfelejtik az előző szűrés eredményét. A hagyományos részecskeképpel ez semmiképpen sem magyarázható!

A jelenséget leíró kvantummechanikai számítás részletes tárgyalását későbbre hagyjuk, most az a célunk, hogy egyáltalán fölvezessük azt a modellt, amelyben a jelenség tárgyalható. A dolog megértése céljából hívjunk segítségül egy sok szempontból hasonló problémát.

Otto Stern és Walter Gerlach



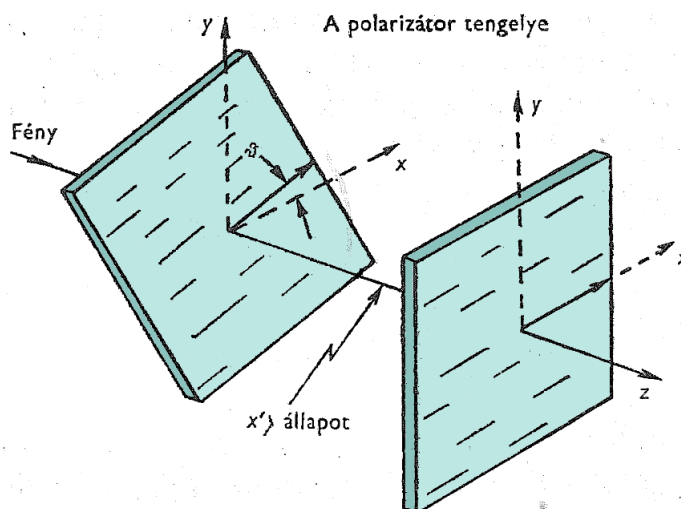
Gerlach levelezőlapja Bohrnak (1922)



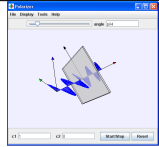
22. ábra.

4.2. Fotonok polarizációja

Egy lézerből kijövő fénysugárt tekintünk, amelynek terjedési iránya legyen a z tengely iránya. A nyaláb útjába egy *kalcit kristályt* helyezünk, amely kettősen tör, azaz a kristályon áthaladó fény térben kétfelé válik. Amint az optikából ismert, a fény transzverzális hullám, és a kalciton áthaladva a fényhullám két nyalábja két egymásra merőleges síkban rezeg. A nyalábok síkban vagy másképpen lineárisan polárosak lesznek. Vizsgáljuk a két nyaláb közül csak az egyiket, úgy, hogy pl. kitakarjuk a másikat. Kitakarás helyett alkalmazhatunk egy olyan eszközt is – *polarizátort*, vagy egy Nicol-prizmát – amely a két nyaláb közül eleve csak az egyiket, azaz valamely irányba poláros fényt enged át, nevezzük ezt a z tengelyre merőleges irányt a polarizátor irányának. A polarizáció iránya a polarizátor z tengely körüli forgatásakor változik. Ha a P polarizátor után egy másik polarizátort helyezünk el, amelyet analizátornak A is szokás nevezni, akkor az analizátoron átmenő fény intenzitása a polarizátor és az analizátor iránya által bezárt szögtől függ. Maximális az intenzitás, ha a két eszköz iránya megegyezik. Ha viszont ez a szög éppen derékszög, azaz P és A egymásra merőlegesen áll, akkor a tapasztalat szerint egyáltalán nincs átmenő fény. Tegyük azonban a P és a rá merőlegesen állított A közé még egy P' polarizátort úgy, hogy ennek iránya P és A irányának szögfelezője legyen, azaz álljon 45° -ban P és A között. Azt tapasztaljuk, hogy az átmenő fény ismét megjelenik.



23. ábra. Egymáshoz képest ϑ szöggel elforgatott polarizációs irányú polarizátorok. A második polarizátort analizátornak is szokás nevezni.

POLARIZÁTOR		
		A bal oldali linkről egy egyszerű java animációt tölthetünk le, amely a polarizátor működését szemlélteti.

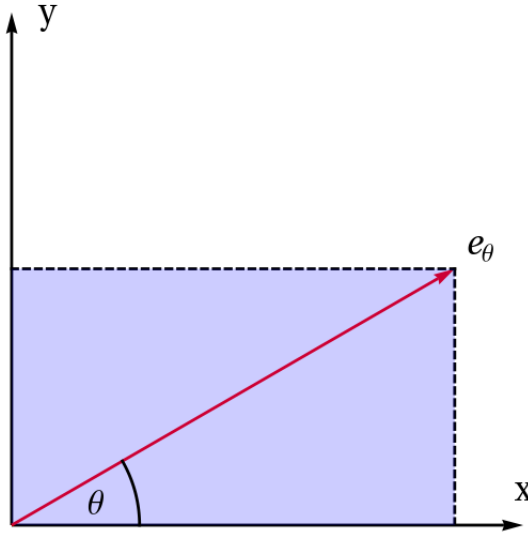
Hogyan magyarázhatjuk a jelenséget fény esetén? A lézerből kijövő fényhullám transzverzális, és elektromos vektora $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cos(\omega t - kz)$. Itt $\mathbf{E}_0$ iránya véletlenszerű, ezért átengedjük először egy x irányú polarizátoron, amely kiválasztja az x irányú rezgést. Ennek nincs y irányú komponense ezért, hogy ha a második polarizátor y irányú, akkor azon már nem megy át az x polarizált komponens. Ha azonban beteszünk a kettő közé egy 45° -os polarizátort, akkor mivel az x irányú rezgést felbonthatjuk egy 45° -os és egy -45° -os rezgés összegére, és a 45° -os komponens átmegy $\mathbf{P}'$ -n (a teljes intenzitás fele), ezután a polarizátor után a fény már 45° -os polarizációjú lesz, azaz "elfelejti" a korábbi rezgését. Ennek a 45° -ban polarizált fénynek azonban megint lesz y irányú összetevője, ezért ezután már át fog menni a harmadik, y irányba beállított analizátoron is, bár az intenzitása ismét gyengülni fog.

Ha meggondoljuk, hasonló dolog történik az ezüstatomokkal a három Stern-Gerlach berendezésen való áthaladás után. Azt kell feltételeznünk tehát, hogy a spin mérése szempontjából az ezüstatomok is valamiképpen hasonlóan viselkednek, mint a fény, azaz mintha egy adott irányú impulzusmomentum valami fajta rezgési iránynak felelne meg, s emiatt az impulzusmomentummal rendelkező részecskék hasonlóan viselkednek, mint a polarizáció szempontjából a fény. De hogyan lehetne a spinnel rendelkező részecskét úgy tekinteni mint egy valamilyen irányban rezgő vektort, hiszen itt diszkrét részecskék csapódnak be a detektorba? Mégis erről van szó, és valójában a fény polarizációjánál is föllép ez a meglepő jelenség, ha úgy tekintjük, hogy a fényhullámban fotonok terjednek. Valóban, ha a polarizátoros berendezésnél a fényforrásból bejövő intenzitást gyengítjük, akkor itt is megjelenik a diszkrétég: a különböző irányba eltérülő és így különböző polarizációjú fotonokat számlálni lehet. Mivel a fény esetében a hullámképből már tudjuk, hogy mi történik, a jelenséget a hullámkép segítségével a fenti leírásnál alaposabban is elemezhetjük. Az elemzés során viszont egy ponton hivatkozni fogunk a fény részecske, azaz kvantumos jellegére, és ilyen módon el tudunk jutni a kvantummechanika bizonyos törvényszerűségeihez.

Tekintsük tehát a z tengely irányába haladó lézersugarat. Ezt átengedjük egy polarizátoron, amely egy a z -re merőleges síkban lévő az x tengellyel valamilyen θ szöget bezáró $\hat{e}_\theta$ egységvektor által kijelölt irányba polarizál. Engedjük át ezt a polarizált fényt ezután egy kettősen törő kalcit kristályon, amelyből két egymástól térben elkülönülő nyaláb lép ki. A kalcit megfelelő elforgatásával elérhető, hogy az egyik nyaláb a vízszintes $\hat{x}$, a másik a függőleges $\hat{y}$ egységvektorok által kijelölt irányba polarizált legyen. Mivel az $\hat{e}_\theta$ az x tengellyel θ szöget zár be, a polarizátorból kijövő $\hat{e}_\theta$ irányú elektromos vektort fölbonthatjuk

$$\hat{e}_\theta = \hat{x} \cos \theta + \hat{y} \sin \theta \quad (4.2)$$

alaknak megfelelően, két egymásra merőleges rezgés összegeként. Ez mutatja, hogy a polarizátor után a fény $\hat{x}$ irányú amplitúdója $\cos \theta$ arányban lesz kisebb, mint a teljes amplitúdó, míg az $\hat{y}$ irányú $\sin \theta$ arányban. A kalcit által a két különböző irányba átengedett két fénynyaláb amplitúdói emiatt éppen ilyen arányban lesznek a kalcitba beérkező teljes amplitúdóhoz képest.



24. ábra. A polarizátorból kijövő $\hat{e}_\theta$ irányú elektromos vektort fölbonthatjuk $\hat{x}$ és $\hat{y}$ irányú komponensek összegére.

Mivel a fény intenzitása (Poynting vektorának nagysága) az amplitúdó négyzetével arányos a megfelelő intenzitások

$$I_x = I_0 \cos^2 \theta \quad \text{illetve} \quad I_y = I_0 \sin^2 \theta, \quad (4.3)$$

ahol I_0 a bejövő intenzitás. Ezt nevezzük az optikában Malus törvényének. Gyöngítsük azonban most I_0 -t. A szemmel való észlelés helyett érzékeny detektorokat helyezünk a két nyaláb útjába, amelyek pl. kattanással jelzik, ha egy fotont nyeltek el. Elegendően gyöngé intenzitás esetén, amikor már csak egyszerre egy foton lehet a berendezésben, azt tapasztaljuk, hogy vagy az egyik, vagy a másik detektor kattant, egyszerre soha sem! Ha összesen N foton észlelték a detektorok és az x irányban polarizált fény útjába helyezett N_x a másik N_y számú foton detektált, akkor a tapasztalat szerint

$$\frac{N_x}{N} = \cos^2 \theta, \quad \frac{N_y}{N} = \sin^2 \theta. \quad (4.4)$$

Nagyszámú részecske esetén ezek az arányok úgy interpretálhatók, mint *detektálási valószínűségek* összhangban a fönti (4.3) intenzitásképletekkel. Ha θ nem 0 vagy $\pi/2$, akkor nem tudjuk teljes bizonyossággal megjósolni, hogy hová ékezik a foton, az x vagy az y irányt érzékelő detektorba. Abban a két speciális esetben azonban, amikor θ éppen 0 vagy $\pi/2$ a kimenetel biztos. Ezért ezt a két irányt a kalcit *sajátirányainak* vagy *sajátállapotainak* nevezzük. Lényeges dolog az, hogy a sajátirányok függenek a kalcit helyzetétől. Ha a kristályt a bejövő fénysugár, mint tengely körül elfordítjuk, akkor a sajátirányok mások lesznek, de a két sajátirány mindig merőleges lesz egymásra, pl. olyan, hogy az előző x tengellyel $+45^\circ$ -ot illetve -45° -ot fog bezárni amint azt az alábbi ábra mutatja.

Egy berendezés sajátállapotait szokás bázisállapotoknak nevezni, mert ezek segítségével a többi állapot a (4.2) összefüggéshez hasonlóan kifejezhető. Ebben az értelemben pl. az A bázisállapotai $\hat{x}$ és $\hat{y}$, míg a hozzá képest 45° -kal elfordított B berendezés sajátállapotait, azaz bázisállapotait jelölhetjük az $\nearrow$ illetve az $\nwarrow$ szimbólumokkal.

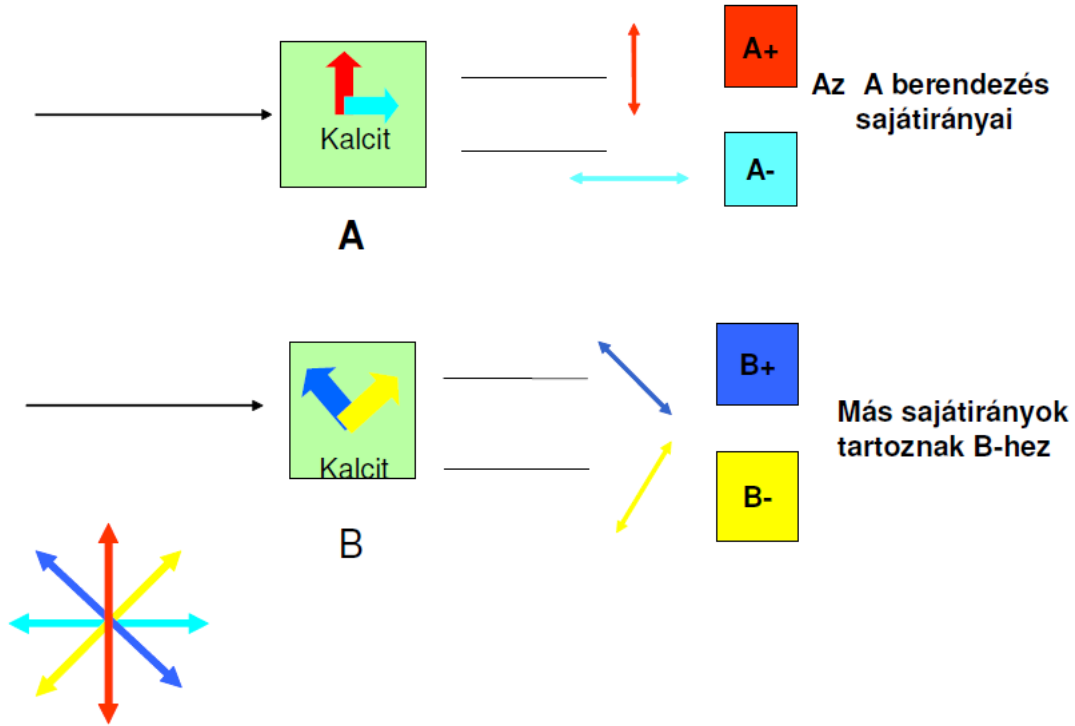
A (4.2) képletben szereplő szögfüggvények kifejezhetők, mint a megfelelő egységvektorok belső vagy skaláris szorzata, amelyet pl. $\hat{x}$ és $\hat{e}_\theta$ esetén így jelölünk: $\langle \hat{x} | \hat{e}_\theta \rangle$. Minthogy egységvektorokról van szó

$$\cos \theta = \langle \hat{x} | \hat{e}_\theta \rangle, \quad \sin \theta = \langle \hat{y} | \hat{e}_\theta \rangle. \quad (4.5)$$

Ennek alapján

$$\hat{e}_\theta = \hat{x} \cos \theta + \hat{y} \sin \theta = \hat{x} \langle \hat{x} | \hat{e}_\theta \rangle + \hat{y} \langle \hat{y} | \hat{e}_\theta \rangle \quad (4.6)$$

Fotonok polarizációja



25. ábra. Az A és a B kalcit mindegyikének két egymásra merőleges, másnéven *ortogonális* sajátiránya van, de ezek különböznek a két berendezés esetén. Egy berendezés sajátirányainak összességét a berendezés bázisállapotainak nevezzük. Látható, hogy A-hoz és B-hez más bázis tartozik.

írható. Összevetve ezt (4.4)-el, azt látjuk, hogy egyetlen fotonra vonatkoztatva a jelenséget úgy lehet magyarázni, hogy a detektálási valószínűségeket a belső szorzatok négyzetével azonosítjuk:

$$P_x = \cos^2 \theta = |\langle \hat{x} | \hat{e}_\theta \rangle|^2, \quad P_y = \sin^2 \theta = |\langle \hat{y} | \hat{e}_\theta \rangle|^2. \quad (4.7)$$

Speciálisan: nyilvánvaló, hogy $\langle \hat{x} | \hat{y} \rangle = \langle \hat{y} | \hat{x} \rangle = 0$, hiszen az x irányú polarizátoron nem megy át a rá merőleges irányba polarizált fény, és fordítva sem.

4.1 Feladat: Adjuk meg az ↗ és az ↘ állapotok kifejtését az $\hat{x}$ és $\hat{y}$ állapotokkal és fordítva. Fejtsük ki az $\hat{e}_\theta = \hat{x} \cos \theta + \hat{y} \sin \theta$ állapotot az ↗ és az ↘ állapotok segítségével.

4.3. A valószínűségi amplitúdó fogalma

Tekintsük ismét az előző kísérletet: a polarizátoron átmenő nyaláb átmegy egy kalcit kristályon, ám ezután egyesítsük újra a kalcit után szétvált nyalábokat egy lencsével. Engedjük át az egyesített nyalábot egy olyan polarizátoron, amely csak $\hat{e}'$ irányba enged át. Az egyesülés után, a fény ismét

$$\hat{e}_\theta = \hat{x} \cos \theta + \hat{y} \sin \theta \quad (4.8)$$

irányban rezgő vektor módjára viselkedik. Ennek a második, $\hat{e}'$ -s irányú polarizátor irányába eső vetülete az $\hat{e}'$ és $\hat{e}$ belső szorzata: $\langle \hat{e}' | \hat{e} \rangle$. Ha mondjuk $\hat{e}'$ merőleges $\hat{e}_\theta$ -ra, akkor az előbbi elgondolás

szerint $\langle \hat{e}' | \hat{e}_\theta \rangle = 0$, s így a második polarizátoron nem megy át semmi. Itt $\hat{e}_\theta$ helyett beírhatjuk az előző (4.8) képletet is, és tagonként számolva ki ezt a belső szorzatot kapjuk, hogy

$$\langle \hat{e}' | \hat{x} \rangle \langle \hat{x} | \hat{e}_\theta \rangle + \langle \hat{e}' | \hat{y} \rangle \langle \hat{y} | \hat{e}_\theta \rangle = \langle \hat{e}' | \hat{x} \rangle \cos \theta + \langle \hat{e}' | \hat{y} \rangle \sin \theta. \quad (4.9)$$

Ha $\hat{e}'$ merőleges $\hat{e}_\theta$ -ra, akkor a geometriából láthatóan $\langle \hat{e}' | \hat{x} \rangle = -\sin \theta$, $\langle \hat{e}' | \hat{y} \rangle = \cos \theta$, s ilyen módon is

$$\langle \hat{e}' | \hat{e}_\theta \rangle = 0 \quad (4.10)$$

nulla az eredmény. Ez utóbbi nem meglepő, hiszen nem történt más, mint hogy $\hat{e}_\theta$ -t kifejtettük vízszintes és függőleges komponensei szerint.

Tekintsük most viszont a fotonokat mint klasszikus részecskéket. Ekkor a következőképpen kell eljárunk. Ha a részecske az első berendezésen való áthaladása után az x irányban polarizált, amely esemény $|\langle \hat{x} | \hat{e}_\theta \rangle|^2 = \cos^2 \theta$ valószínűséggel történik meg, akkor a részecskét ezután az $\hat{e}'$ irányban $|\langle \hat{e}' | \hat{x} \rangle|^2 = |-\sin \theta|^2 = \sin^2 \theta$ valószínűséggel detektáljuk. Annak valószínűsége tehát, hogy a foton előbb az x irányba polarizálódik, majd átmegy az $\hat{e}'$ irányba állított polarizátoron $\sin^2 \theta \cos^2 \theta$, mivel a két eseményt függetlennek tekinthetjük. A másik lehetőség, hogy a foton a kalcit után az y irányban lesz polarizált $|\langle \hat{y} | \hat{e}_\theta \rangle|^2 = \sin^2 \theta$ valószínűséggel, majd innen az $\hat{e}'$ -be $|\langle \hat{e}' | \hat{y} \rangle|^2 = |\cos \theta|^2 = \cos^2 \theta$ valószínűséggel kerül. Ha a kétfajta út független, márpedig a klasszikus kép alapján ezt gondolhatjuk, akkor az összes valószínűség a kétféle úthoz tartozó valószínűségek összege, vagyis $2 \sin^2 \theta \cos^2 \theta$. Ez pedig láthatólag különbözik a hullámkép alapján kapható valószínűségtől, ami $\langle \hat{e}' | \hat{e} \rangle = 0$ esetén nulla volt.

A helyes eredményt a hullámkép adja, a tényleges valószínűség a fönti kísérletnél, tehát a helyes eredmény:

$$P(\hat{e}' \leftarrow \hat{e}) = |\langle \hat{e}' | \hat{x} \rangle \langle \hat{x} | \hat{e}_\theta \rangle + \langle \hat{e}' | \hat{y} \rangle \langle \hat{y} | \hat{e}_\theta \rangle|^2. \quad (4.11)$$

Konklúzió: Minden $\hat{e} \rightarrow \hat{e}'$ átmenethez hozzárendelünk egy úgynevezett valószínűségi amplitúdót:

$$c(\hat{e}' \leftarrow \hat{e}) = \langle \hat{e}' | \hat{e} \rangle, \quad (4.12)$$

egy számot, amely általában véve komplex, és ha a részecske több különféle úton is mehet, akkor az egymás után következő lehetőségek amplitúdóit össze kell szorozni, illetve ha ez több úton is történhet, akkor a megfelelő amplitúdókat össze kell adni és a végén négyzetre emelni, ez adja a valószínűséget. Azaz nem szabad a valószínűségeket összeadni, hanem a megfelelő amplitúdókat kell összeadni és a végén négyzetre emelni.

Létezik olyan kristály, amely a ráeső *bármilyen irányban lineárisan poláros* bemenő síkhullámot *két, azonos intenzitású* ellentétes értelmű cirkulárisan poláros nyalábra bontja, ezeket $+$ és $-$ állapotúaknak fogjuk nevezni. Ezek az úgynevezett pozitív helicitású (régembi elnevezéssel balra cirkuláris) illetve negatív helicitású fotonok (az utóbbiakat nevezték vagy nevezik néha ma is jobbra cirkulárisan polárosnak). A fizikai mennyiség, amelyben ezek különböznek az általuk vitt impulzusnyomatékban van. Egy foton ilyenkor $\hbar$, illetve $-\hbar$ impulzusnyomatékot visz, a haladás irányával $+$ esetén jobbsavart, $-$ állapot esetén balcsavart alkotva. Ennek alapján ki lehet deríteni, (4.2 Feladat), hogy a cirkulárisan poláros fotonok kapcsán föllépő amplitúdók általában szükségképpen komplex számok, és az eredmény a következő választás esetén konzisztens a kísérletekkel: $\langle + | \hat{e}_\theta \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\theta} e^{i\gamma}$, ahol a γ egy konvenció által rögzített valós szám, s ezt $\gamma = 0$ -nak szokás választani, azaz:

$$\langle + | \hat{e}_\theta \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\theta}. \quad (4.13)$$

Így speciálisan $\hat{e}_\theta = \hat{x}$, (ahol $\theta = 0$), illetve $\hat{e}_\theta = \hat{y}$ (ahol $\theta = \pi/2$) esetén:

$$\langle + | \hat{x} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle + | \hat{y} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\pi/2}. \quad (4.14)$$

A negatív helicitású fotonokra ugyanez az eredmény:

$$\langle -|\hat{e}_\theta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta}.$$

4.2 Feladat: Bontsuk föl az $\hat{e}_\theta$ irányú lineárisan poláros fotont egy $\hat{x}$ és $\hat{y}$ irányban lineárisan polárosra, majd engedjük át egy $+$ -os szűrőn, úgy, hogy közben nem vizsgáljuk, hogy $\hat{x}$ vagy $\hat{y}$ irányú volt a foton. A $\langle +|\hat{e}_\theta\rangle$ valószínűségi amplitúdó így két rész interferenciájából származik: $\langle +|\hat{e}_\theta\rangle = \langle +|\hat{x}\rangle\langle \hat{x}|\hat{e}_\theta\rangle + \langle +|\hat{y}\rangle\langle \hat{y}|\hat{e}_\theta\rangle$. A tapasztalat szerint $|\langle +|\hat{e}_\theta\rangle|^2 = \frac{1}{2}$, a θ szögtől függetlenül.

Mutassuk meg, hogy nem lehet egyszerre $\langle +|\hat{x}\rangle$ és $\langle +|\hat{y}\rangle$ is valós, azaz nem lehet $\pm 1/\sqrt{2}$.

Mutassuk meg, hogy a fenti komplex amplitúdók viszont tetszőleges θ esetén helyes eredményt adnak.

4.3 Feladat: Mutassuk ki hasonló okoskodással ugyanezt a $\langle -|\hat{e}_\theta\rangle$ amplitúdókra.

4.4 Feladat: Tudjuk, hogy $\langle \hat{e}_\theta|\hat{e}_{\theta'}\rangle = \cos(\theta - \theta')$, (honnán tudjuk?). Engedjük a bejövő nyalábot közben át egy $\pm$ berendezésen, azaz vizsgáljuk az amplitúdót a következő fölbontásban: $\langle \hat{e}_\theta|\hat{e}_{\theta'}\rangle = \langle \hat{e}_\theta|+\rangle\langle +|\hat{e}_{\theta'}\rangle + \langle \hat{e}_\theta|-\rangle\langle -|\hat{e}_{\theta'}\rangle$. Mutassuk meg, hogy szükségképpen $\langle \hat{e}_\theta|+\rangle = \langle +|\hat{e}_\theta\rangle^ = e^{i\theta}$, és $\langle \hat{e}_\theta|-\rangle = \langle -|\hat{e}_\theta\rangle^* = e^{-i\theta}$, azaz az amplitúdót fordított sorrendben számítva, az az eredeti amplitúdó komplex konjugáltjaként adódik.*

4.5 Feladat: Mutassuk meg, egy xy berendezés közbeiktatásával és az amplitúdók interferenciájával, hogy a fenti választás esetén, a tapasztalattal összhangban $\langle +|-\rangle = 0$.

Térjünk vissza most a (4.6) képletre, illetve általában a foton polarizációs állapotainak pl. $\hat{e}_\theta, \hat{x}$, vagy $+$ jellel vett jelölésére. Láttuk, hogy fizikai jelentése általában ezek belső szorzat jellegű kombinációinak van. Mégis a továbbiakban az ilyen típusú belső szorzat végrehajtását mintegy megelőlegezve, magukat a fenti polarizációs állapotokat is beletesszük egy $|\rangle$ alakú zárójelpárba, azaz a fenti állapotokat már eleve $|\hat{e}_\theta\rangle, |\hat{x}\rangle, |+\rangle$ alakúnak írjuk. Eszerint az $|\hat{e}'\rangle \leftarrow |\hat{e}_\theta\rangle$ átmenethez tartozik a $\langle \hat{e}'|\hat{e}_\theta\rangle$ amplitúdó, amely angolul egy bracket, azaz zárójel. Ezért P. Dirac javaslatára az $|\hat{e}_\theta\rangle$ alakba írt állapotokat "ket"-nek is szokás nevezni. Azt az állapotot, amibe a végén kerül, vagy kerülhet a részecske az $\langle \hat{e}'|$ alakba írva ez utóbbit "bra" állapotnak szokás mondani. Térjünk vissza most a (4.6) képletre, amelyet ezek szerint az

$$|\hat{e}_\theta\rangle = |\hat{x}\rangle\langle \hat{x}|\hat{e}_\theta\rangle + |\hat{y}\rangle\langle \hat{y}|\hat{e}_\theta\rangle = c_x|\hat{x}\rangle + c_y|\hat{y}\rangle \quad (4.15)$$

alakba is írhatunk, ahol $c_x = \langle \hat{x}|\hat{e}_\theta\rangle$, $c_y = \langle \hat{y}|\hat{e}_\theta\rangle$ a megfelelő komplex valószínűségi amplitúdók. Itt az $|\hat{e}_\theta\rangle$ állapot láthatóan az egymásra merőleges $|\hat{x}\rangle$ és $|\hat{y}\rangle$ ($\langle \hat{x}|\hat{y}\rangle = 0$) állapotok – amelyeket *bázisállapotoknak* nevezhetünk – lineáris kombinációjaként van fölírva. Arra is emlékeztetünk, hogy ezeket a bázisállapotokat egy adott módon beállított kalcit kristály sajátállapotainak neveztük. Nyilvánvaló továbbá, hogy ugyanezt az $|\hat{e}_\theta\rangle$ állapotot egy másképpen beállított kalcit másféle sajátállapotainak más lineáris kombinációjaként is föl lehetett volna írni.

4.6 Feladat: Tekintsünk egy függőlegesen polarizált fénynyalábot, amely egymás után áthalad a következő berendezéseken:

(a) polarizátor (Nicol-prizma), mely csak a függőlegesen polarizált fényt engedi át.

(b) polarizátor (Nicol-prizma), mely csak a függőlegessel $+45^\circ$ -ot bezáró síkban polarizált fényt engedi át.

(c) polarizátor (Nicol-prizma), mely csak a vízszintesen polarizált fényt engedi át.

(d) Mágneses térbe helyezett speciális anyag, ami $+45^\circ$ -al elforgatja a polarizációs síkot (Faraday-effektus).

(e) $\lambda/4$ -es lemez, ami $\frac{\pi}{2}$ relatív fáziskülönbséget hoz létre a vízszintesen és függőlegesen polarizált komponensek között.

(f) polarizátor (Nicol-prizma), mely csak a függőlegessel -45° -ot bezáró síkban polarizált fényt engedi át.

4.6.1 Feladat: Legyen a beeső fényhullám amplitúdója E . Milyen polarizációjú és mekkora amplitúdójú fény hagyja el az a , b , c , d , e és f eszközöket?

4.6.2 Feladat: Egyetlen függőlegesen polarizált foton lép be a rendszerbe. Mi figyelhető meg az a , b , c , d , e és f eszközök után?

(Mekkora valószínűséggel jut el oda a foton és milyen lesz a polarizációja)?

4.6.3 Feladat: A fény állapota jellemezhető egy vektorral. Az E amplitúdójú függőleges polarizációjú fény pl. a $\phi = \begin{pmatrix} 0 \\ E \end{pmatrix}$ vektorral írható le. Egy berendezésen áthaladva a fényt leíró vektor megváltozik.

Ezt a változást egy mátrixszal lehet leírni. Pl. az (a) berendezéshez tartozó mátrix: $A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Írjuk fel a többi berendezésekhez tartozó mátrixokat (B, C, D, E, F)! Adjuk meg hogyan transzformálódik az imént megadott vektor, amint sorban halad végig az eszközökön!

4.6.4 Feladat: Az előző pontban olyan koordináta-rendszert választottunk, amelynek x tengelye vízszintes, y tengelye függőleges volt. Válasszunk most egy ehhez képest 45° -kal elforgatott koordináta-rendszert, amiben a $\begin{pmatrix} 0 \\ E \end{pmatrix}$ vektor -45° -ban polarizált fényt ír le. Írjuk fel a függőlegesen polarizált fényt jellemző vektort ebben a koordináta-rendszerben! Írjuk fel a berendezéseket leíró transzformációs mátrixokat (A', B', C', D', E', F') és az egyes berendezéseken való áthaladás utáni állapotvektorokat is az elforgatott bázisban és végezzük el az állapotvektorok transzformációját!

4.6.5 Feladat: Határozzuk meg a transzformációs mátrixok sajátértékeit és sajátvektorait!

4.6.6 Feladat: Az eredeti és az elforgatott koordináta-rendszerben felírt állapotvektorok és mátrixok egymásba transzformálhatók. Hogyan?

4.4. Általánosítás kettőnél több dimenzióra

A Stern-Gerlach berendezésre visszatérve, ezüst atomok esetén az inhomogén mezőben szétváló nyalábok száma kettő volt, de ugyanez a helyzet H-, Na-, K-atomok esetén is. Ennek megfelelően az ezüst atomok esetén azt mondjuk, hogy a kvantummechanikai probléma kétdimenziós. Kétdimenziós a foton polarizációját érintő főntebb tárgyalta eset is. Vannak azonban olyan hasonló feladatok illetve kísérletek, ahol a jelenség többdimenziós. Stern-Gerlach típusú kísérletet más atomokkal elvégezve azt találták, hogy az inhomogén mágneses mezőben eltérülő nyalábok száma nem csak kettő lehet. Pl. higany (Hg) esetén csak egy nyaláb van, viszont vanádium (V) esetén 4, mangán (Mn) esetén 6, vas (Fe) esetén 9. Az ok a kérdéses atomok sajátimpulzusmomentumával, spinjével van kapcsolatban és a magyarázatot később látni fogjuk. Ezekben az esetekben az n dimenzió szám a nyalábok száma, azaz a főnti példákban $n = 1, 4, 6, 9$.

Az ilyen típusú kísérletekből a következő szabályok vonhatók le. A részecskének van egy kezdő bemenő állapota, jelöljük ezt ψ -vel, amit valamilyen módon preparáltunk. Ez a részecske belép egy olyan berendezésbe, amelynek n különböző kimenete lehetséges, és amely után a részecske több különböző, a berendezésre jellemző u_k , ($k = 1, 2, \dots, n$) állapotba kerülhet (egy részecske mindig csak egybe). Ez az n darab u_k alkotja az adott berendezéshez tartozó bázisállapotokat, vagy röviden *bázist*. Minden kimenethez rendelhetünk egy komplex számot a $c_k = \langle u_k | \psi \rangle$ valószínűségi amplitúdót, amelynek abszolút érték négyzete megadja azt, hogy mekkora valószínűséggel megy a k -adik csatornába a részecske:

$$P(u_k \leftarrow \psi) = |\langle u_k | \psi \rangle|^2 = |c_k|^2. \quad (4.16)$$

Erről csak úgy tudunk meggyőződni, ha oda is tesszük a detektort. Mivel a részecske valamelyik csatornába biztosan megy:

$$\sum_{k=1}^n |\langle u_k | \psi \rangle|^2 = \sum_{k=1}^n |c_k|^2 = 1. \quad (4.17)$$

Ha eleve valamelyik u_k állapot volt a bejövő, akkor az eredmény biztosan ugyanez lesz. Csak a k -adik csatornába történik kimenet, a többibe biztosan nem, azaz:

$$\begin{aligned} |\langle u_k | u_k \rangle| &= 1, \\ \langle u_k | u_l \rangle &= 0, \quad \text{ha } k \neq l. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Emiatt az u_k állapotokat az adott módon beállított berendezés *sajátállapotainak* nevezzük. Megállapodunk továbbá abban, hogy azonos be- és kimenő állapot esetén, nem csak az abszolút érték, hanem maga a szorzat is 1: $\langle u_k | u_k \rangle = 1$. A fenti összefüggések közül az első: $|\langle u_k | u_k \rangle| = 1$ tulajdonságról azt mondjuk, hogy a bázisállapot normált. A második: $\langle u_k | u_l \rangle = 0$ tulajdonságról pedig azt mondjuk, hogy a bázisállapotok ortogonálisak, vagy másnéven merőlegesek. A két feltételt együttesen teljesítő állapotokat ortonormált bázisnak nevezzük.

Ha a részecskét előbb beengedjük egy másik berendezésbe, amelynek sajátállapotai v_i -k, majd a csatornákból kijövő részecskenyalábokat újra egyesítjük, és ezután engedjük az A berendezésbe, akkor az u_k mérési eredmény amplitúdóját a

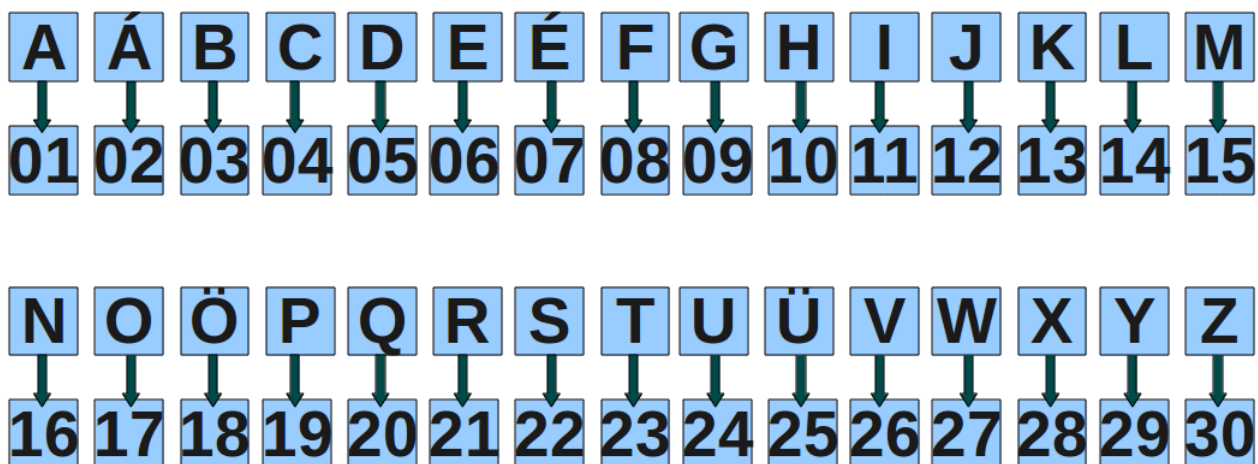
$$\sum_{i=1}^n \langle u_k | v_i \rangle \langle v_i | \psi \rangle \quad (4.19)$$

összeggel kell kiszámítani.

5. Kvantumkriptográfia, kvantumos titkosítás kétállapotú kvantumrendszerrel

5.1. Klasszikus kriptográfia

Egy szöveg rejtjelezése a titkosítás vagy idegen szóval kriptográfia régóta használatos üzenetek küldésére, kommunikációra. A kvantummechanika kétállapotú rendszerei pl. fotonok polarizációja erre egy érdekes lehetőséget nyújt. Mielőtt ezt tárgyalnánk röviden ismertetjük az úgynevezett klasszikus titkosító kulcsú titkosítás módszerét. A szöveg betűit a titkosítás céljából egy-egy számmal helyettesítjük (26).



26. ábra. A szöveg titkosításához először az egyes betűket számokkal helyettesítjük

A titkosítás abból áll, hogy az egyes betűkhöz tartozó számokat mondjuk egy 5-tel nagyobb számmal helyettesítjük Mod 30. Ekkor A KOCKA EL VAN VETVE szöveg így néz ki: E ÖSGÖE

IP AER AIXAI. Az üzenet olvasásához a kulcsot ismernie kell a küldőnek és a fogadónak is, de másoknak nem. A kulcs ebben az esetben az 5-ös szám, amelyet az üzenet olvasásakor a fogadó kivon az egyes karaktereknek megfelelő számból. Egy ilyen egyszerű módon kódolt szöveg azonban gyorsan feltörhető vagyis a kulcs megfejthető.

Azonban ha a betűt kódoló számhoz mindig más és más véletlenszerűen generált számot adunk, majd az így kapott szöveget írjuk le, az már nem lesz megfejthető, csak annak számára, aki a kulcsot is ismeri. Ez utóbbi a Vernam-kód, Gilbert Vernam amerikai kutató nevére, aki ezt a módszert 1918-ban javasolta. A kulcsot azonban időről időre változtatni kell, mert egyébként az is megfejthető. Be lehet ugyanis bizonyítani, – ez 1925 körül történt – hogy a biztonságos továbbításhoz, vagyis a megfejthetlenséghez az kell, hogy a kulcs és a kódolandó szöveg hossza azonos legyen. Ezt a kulcsot emiatt egyszeri blokknak (one time pad) szokás nevezni. Ilyen titkosítással üzent Che Guevara a bolíviai őserdőkből Fidel Castrónak, illetve Dr. Sorge a szovjet elhárítás Japánban kémkedő tisztje a II. világháborúban. Ő pl. Németország statisztikai évkönyvének előre megbeszélte számtáblázatait használta a kódolásra. A kritikus pont nyilvánvalóan a küldő és a fogadó által használt kulcs azonosságának biztosítása.

Megjegyezzük, hogy manapság pl. banki adatok továbbítására más módszert használnak, egy úgynevezett nyilvános kulcsú titkosítást, amely valójában szintén alkalmaz egy gyakorlatilag megfejthetetlen, titkos kulcsot is. Ennek az ún. RSA-algoritmuson alapuló módszernek a leírása megtalálható pl. a

<http://hu.wikipedia.org/wiki/RSA-eljaras>

címen.

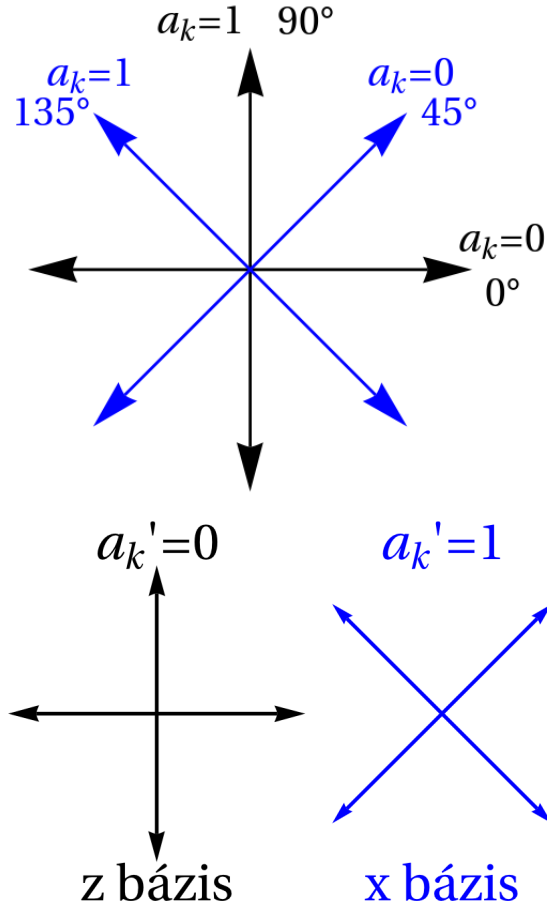
Megjegyezzük még, hogy a gyakorlatban mind a kódolandó szöveget, mind a kulcsot megfelelő hosszúságú bináris (0 és 1 számokból álló) karakterek sorozatával szokás megadni.

Itt most viszont egy olyan kvantumos módszert fogunk ismertetni, amellyel elvileg is titkosan lehet egy azonos kulcsot készíteni két fél, Alíz és Bob számára. Ezt kvantumos kulcs továbbításnak, vagy újabban kvantumos kulcsgenerálásnak szokás nevezni, ez az alapja a kvantumos titkosításnak a kvantumkriptográfiának.

5.2. Kvantumkriptográfia és a BB84 protokoll

A két fél: Alíz (A) és Bob (B) üzenetei nyilvánosak lehetnek, de a kódoláshoz és a visszafejtéshez titkos kulcsot használnak, amelyet csak ők ismernek. A kvantumos módszer valójában a titkos kulcs átviteléhez szükséges A és B között, ezért a módszert kvantumos kulcs továbbításnak (vagy kulcszétosztásnak) szokás nevezni. Az angol Quantum Key Distribution szavak rövidítéseként QKD módszerről illetve protokollról is szoktak beszélni. A két fél (Alíz és Bob) a kulcsot mint megfelelő qubitek sorozatát juttatják el egymáshoz, így ha azokon egy harmadik, illetéktelen személy mérést hajtana végre, akkor elrontja az eredeti állapotot, amit a két fél statisztikai módszerek alapján észre tud venni.

Az első QKD protokoll, a BB84-nek nevezett módszer, amelyet Bennett és Brassard javasolt 1984-ben. Ez változtatva két nem ortogonális, nem merőleges bázist használ a kód előállítására. A BB84 a következőképpen működik. A előállít egy *klasszikus* véletlen bitsorozatot, melynek k -adik tagja legyen a_k . Ennek a bitsorozatnak egy alkalmas részsorozata lesz majd a titkos kulcs. Ezt fogja A kódolni egy $|\varphi_k\rangle$ kvantumállapot-sorozattal, amelyek egy kétdimenziós tér elemei. Ezeket a klasszikus bitekkel szemben kvantumos biteknek *qubitek*nek szokás nevezni. A kódolás módjának meghatározásához A egy *másik* véletlen *klasszikus* bitsorozatot a'_k -t használ a következőképpen: a_k -t attól függően kódolja *egyik vagy másik bázisban*, hogy mi az a'_k értéke. Fizikailag, a tekintett qubiteket fotonok polarizációs állapotainak tekintjük, a jelenleg már kereskedelmi forgalomban is kapható kvantumtitkosító berendezésekben valóban ezeket is használják.



27. ábra. Alíz a fönti beállításokat használja

A két bázist a következőképpen választjuk. Az egyiket, melyet Z bázisnak nevezünk, a $|\leftrightarrow\rangle$ és $|\updownarrow\rangle$ állapotok, azaz a horizontálisan (vízszintesen), illetve vertikálisan (függőlegesen) polarizált fotonállapotok alkotják. Ezekre a korábbiak szerint érvényesek a következők, $\langle\leftrightarrow|\leftrightarrow\rangle = \langle\updownarrow|\updownarrow\rangle = 1$.

A másik bázis elemei, amelyet X bázisnak nevezünk, a $+45^\circ$ -ban, és -45° -ban polarizált fotonállapotok, melyeket $|\nearrow\rangle$ és $|\nwarrow\rangle$ módon jelölünk. Ez a bázis szintén ortonormált. A két bázis között a következő kapcsolat áll fenn: $|\nearrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\leftrightarrow\rangle + |\updownarrow\rangle)$, illetve $|\nwarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\updownarrow\rangle - |\leftrightarrow\rangle)$.

5.1 Feladat: Hogyan kapjuk meg a Z bázis elemeit az X bázis elemeinek segítségével?

A protokoll szerint, ha $a'_k = 0$, akkor Alíz a Z bázist használja. A Z bázisban pedig ha $a_k = 0$, akkor a $|\varphi_k\rangle = |\leftrightarrow\rangle$, ha $a_k = 1$, akkor pedig a $|\varphi_k\rangle = |\updownarrow\rangle$ fotonállapotot kódolja. $a'_k = 1$ esetén viszont Alíz az X bázist használja, és ekkor ha $a_k = 0$, akkor $|\varphi_k\rangle = |\nearrow\rangle$, illetve ha $a_k = 1$, akkor $|\varphi_k\rangle = |\nwarrow\rangle$.

Ezután A át küldi a $|\varphi_k\rangle$ kvantumozott véletlen kódsorozatot B -nek, aki mérést hajt végre a $|\varphi_k\rangle$ állapotokon. Mérőberendezését ő is véletlenszerűen állítja be Z vagy X irányba, egy általa választott b'_k klasszikus bitsorozat segítségével, ugyanazon előírás szerint mint A . Vagyis, ha $b'_k = 0$, akkor B is Z irányban mér, míg ha $b'_k = 1$, akkor X irányban. A mérés eredményétől függően ő is létrehozza saját klasszikus b_k bitsorozatát, ugyanazon előírás szerint, ahogyan A . Azaz, ha a mérési eredmény a Z beállítás során $|\leftrightarrow\rangle$, akkor $b_k = 0$, ha pedig $|\updownarrow\rangle$ akkor $b_k = 1$. Illetve, ha az X beállítást használta, akkor $|\nearrow\rangle$ esetén lesz $b_k = 0$, míg $|\nwarrow\rangle$ esetén $b_k = 1$.

Világos, hogy ha B éppen véletlenül azonos bázisban mért, mint amelyben A kódolt, akkor az

eredmény elvileg egységnyi valószínűséggel ugyanaz, mint amit A kódolt. Ha viszont B nem azonos bázisban mért, mint amelyben A kódolt, akkor az eredménye csak $1/2$ valószínűséggel esik egybe a_k -val. Az alább látható táblázat összefoglalja a lehetséges kimeneteket, a táblázat 3-6. sorának a 4-7. oszlopaiban a megfelelő mérési valószínűségeket adtuk meg:

		$ \varphi_k\rangle$	$b'_k = 0$		$b'_k = 1$	
			$ \leftrightarrow\rangle$	$ \updownarrow\rangle$	$ \nearrow\rangle$	$ \nwarrow\rangle$
$a'_k = 0$	$a_k = 0$	$ \leftrightarrow\rangle$	1	0	$1/2$	$1/2$
$a'_k = 0$	$a_k = 1$	$ \updownarrow\rangle$	0	1	$1/2$	$1/2$
$a'_k = 1$	$a_k = 0$	$ \nearrow\rangle$	$1/2$	$1/2$	1	0
$a'_k = 1$	$a_k = 1$	$ \nwarrow\rangle$	$1/2$	$1/2$	0	1
			$b_k = 0$	$b_k = 1$	$b_k = 0$	$b_k = 1$

Ezek után B egy nyilvános csatornán közli A -val az ő b'_k sorozatát, de titokban tartja b_k -kat. A most már meg tudja mondani B -nek, hogy melyek voltak ezek közül olyanok, amelyekkel az ő kódolási módja megegyezett, azaz kiválasztják azokat a vesszőtlen elemeket, amelyekre a vesszősek megegyeztek. Látható, hogy ha $b'_k = a'_k$, akkor $b_k = a_k$ egységnyi valószínűséggel. Az ezeknek a k -nak megfelelő biteket megtarthatják, mint titkos kulcsot, ekkor ugyanis a kiválasztott a_k -k részhalmaza megegyezik a megfelelő b_k -k halmazával a másik oldalon. Ha valaki viszont csak a vesszős bitsorozatról szerez tudomást, számára az a_k -k (és b_k -k is) egyformák, azaz $1/2$ valószínűséggel lehetnek 0-k vagy 1-ek. Hiába tudja meg valaki a nyilvános csatorna lehallgatásával a b'_k -k értékét, annak alapján pontosan $1/2$ annak a valószínűsége, hogy a_k értéke 0 volt vagy 1, azaz nem jut információhoz.

Valójában azonban A és B nem lehetnek biztosak abban, hogy a két megtartott bitsorozat pontosan azonos, aminek két fő oka lehet. Egyrészt lehetséges, hogy maga a qubiteket átvívó csatorna nem tökéletes, azaz zajos. Másrészt előfordulhat, hogy van egy harmadik személy, aki lehallgatja az átvitt információt. Ezt a személyt E -nek szokás nevezni az angol "eavesdropper" (hallgatózó) szó miatt. Természetesen E -nek az az érdeke, hogy A és B ne vegyék észre, hogy ő lehallgatta az üzenetet. A kvantumcsatorna használata miatt azonban A tudomást szerezhet arról, hogy a csatornát lehallgatják. Hogy ezt hogyan tehetik meg, az alábbiakban tárgyaljuk.

E két módon próbálhat tudomást szerezni arról, hogy milyen $|\varphi_k\rangle$ qubit állapot ment át A és B között. Egy primitív módszer lehet, ha E mérést hajt végre a qubiteken. Tudjuk azonban, hogy a kvantummechanikában egy mérés általában befolyásolja az állapotot kivéve, ha E abban a bázisban mér, amelyben A kódolt. Noha E esetleg tudja azt, hogy A melyik két lehetséges (az X vagy a Z) bázist használta kódolásra, mégsem tudja megfejtetni a kulcsot, mivel a bázisválasztás véletlenszerűen történik. Így E még e tudás birtokában is átlagosan csak a méréseinek felében nem fogja megváltoztatni az eredményt. Egyébként maguknak a választott bázisoknak a száma is lehet több stb. Másrészt pedig, ha a kvantuminformációátvitel qubitjeit, mint a fenti példában fotonokkal valósítjuk meg, akkor a közbeavatkozás nyomán a foton elnyelődhet és meg sem érkezik B -hez.

Egy ravaszabb módszer lehet ennél, ha E megpróbálja lemásolni az átvitt qubit értékét egy általa külön erre a célra használt kvantumregiszterbe. Meg lehet azonban mutatni, hogy kvantumállapotokat másolni 100 %-os hitelességgel elvileg is lehetetlen. Ez az ún. *nemklónozhatósági tétel*.

Látjuk tehát, hogy vagy a csatorna esetleges zajossága, vagy E közbeavatkozása miatt, az átvitt qubitrendszer megváltozhat. Erről A és B azonban tudomást vehet oly módon, hogy fölfaldozza a megtartott és a közbeavatkozás nélkül biztosan megegyezőnek gondolt biteinek egy részét, úgy hogy ezeket nyilvánosan egyeztetik. Meg lehet mutatni, hogy annak a valószínűsége, hogy a titkosan tartott bitek között valami miatt nem egyezők vannak, arányos a nyilvánosan egyeztetett és eltérőnek talált bitek arányával. Ha ez utóbbi kicsi, tehát a nyilvánosan egyeztetett bitek lényegében megegyeznek a két oldalon, akkor ugyanez igaz a titkosan tartott bitekre is.

Megjegyezzük még, hogy az itt ismertetett BB84-protokollon kívül számos más kvantumtitkosítási protokoll is létezik.

6. EPR-paradoxon, Bell-egyenlőtlenség

A klasszikus fizikában megvalósított mérés során a mérés *megállapítja* egy test, egy részecske valamilyen tulajdonságát, amely a méréstől függetlenül a mérés végrehajtása előtt létezőnek tételezhető föl. A kvantummechanikában viszont – a tapasztalatok szerint – egy bizonyos szempontból azonos tulajdonságú objektumokon, részecskéken egy másik tulajdonságot megállapító mérés több különböző eredményt adhat. A legegyszerűbb példa, a korábban látott fotonpolarizációs kísérletek közül az, ha mondjuk egy olyan nyalábot vizsgálunk, amelyet előzőleg pl. a vízszintessel 45° -os szöget bezáró irányban polarizáltunk. Ha ezt a nyalábot egy olyan módon beállított kalcit kristályra bocsátjuk, hogy annak polarizációs sajátirányai a vízszintes és függőleges irányok legyenek, akkor a kalciton való áthaladás után a fotonok kb. fele vízszintes a másik fele függőleges polarizációjú lesz.

Ezzel kapcsolatban fölvethető az a kérdés: Mitől függ egy adott, eredetileg 45° -ban polarizált foton esetén, hogy az vízszintes vagy függőleges polarizáltságú lesz a kalcit után? A kvantummechanika válasza erre az, hogy a 45° -os foton a kalcittal való *kölcsönhatás során válik* vízszintes vagy függőleges irányúvá. Ez a bejövő fotonba nincs előre belekódolva, ezért eleve nem is lehetséges a kérdésre egy adott foton esetén biztos választ adni, itt a *legtöbb* amit mondhatunk, a különböző kimenetek valószínűségének megadása. Másképpen mondva, ez a mérés nem megállapítja a foton egy korábban meglévő tulajdonságát, hanem megteremti ezt a tulajdonságot, a megfelelő valószínűséggel.

Ez a válasz azonban nem mindenkit elégít ki, mert elgondolható egy olyan válasz is, hogy valószínűleg minden foton esetén már a kísérlet tényleges végrehajtása előtt létezik mindkét tulajdonság. Tehát pl. az, hogy 45° -ban is polarizált és ugyanakkor vízszintesen is polarizált, ha ez utóbbit kaptuk a mérés végén. Az más kérdés, hogy a kvantummechanika nem ad erről számot, mert nem adható meg egyszerre egységnyi valószínűséggel – azaz teljes biztonsággal – a polarizáció iránya egy adott részecskénél két egymással nem párhuzamos irányban. Ez pedig azt jelentheti, hogy létezik valamilyen – a kvantummechanikánál mélyebb – elmélet, amely szerint ezek a tulajdonságok egyszerre és pontosan megvannak a mért objektumban. Mivel pedig a kvantummechanika erről nem ad számot, azt nem tekinthetjük a fizikai valóság *teljes* leírásának. Ezt az utóbbi álláspontot képviselte többek között A. Einstein is: és ezért született Einstein, B. Podolsky és N. Rosen híres cikke 1935-ben melynek címe: “Teljesnek tekinthető-e a fizikai valóság kvantummechanikai leírása?” A cikk végén arra a következtetésre jutnak, hogy a kvantummechanika nem teljes elmélet, de megjegyzik, hogy szerintük egy teljesebb elmélet a jövőben meg fog születni.

Egzakt definíciót igyekeznek adni a teljes elméletéről:

“Teljes az elmélet, ha a *valóság minden elemének* megfelel egy fizikai mennyiség az elméletben.”

De mi a valóság egy eleme? Erre is választ kapunk.

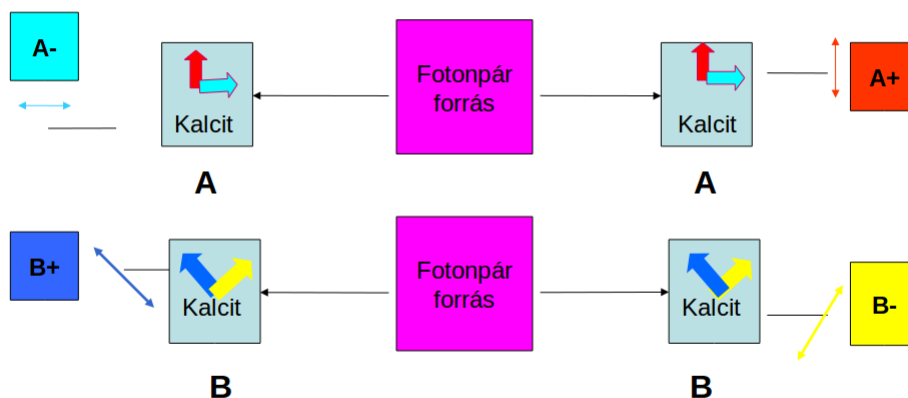
“Ha egy fizikai rendszer bármifajta megzavarása nélkül teljes bizonyossággal, azaz egységnyi valószínűséggel meg tudjuk mondani egy fizikai mennyiség értékét, akkor létezik a fizikai valóság egy olyan eleme, amely megfelel ennek a mennyiségnek.”

Einstein Podolsky és Rosen (EPR) egy részecskepáron végzett gondolat kísérlettel egy konkrét fizikai szituációt mutatnak be, amely szerintük mutatja azt, hogy a kvantummechanika nem teljes. Példájukban a részecskepár koordinátájának és az impulzusának mérését vizsgálják. Ehelyett azonban érdemes inkább azt a D. Bohm által 1957-ben javasolt gondolat kísérletet tekinteni, amely egy egyszerűbb rendszeren ismétli meg az EPR-féle gondolatmenetet, ahol a mérési eredményeknek csak kétfajta kimenete lehetséges, azaz már egy kétdimenziós állapottér elegendő a probléma tárgyalására. Itt konkrétan fotonok polarizációját tekintjük.

Az azóta ténylegesen is sokszor megvalósított kísérlet lényege a következő. Egy forrás fotonpárokat generál, amelyek a térben különböző irányokban, mondjuk a forrástól jobbra és balra terjednek. A pár tagjainak polarizációs állapotát egymástól függetlenül mérni lehet. A mérések szerint a

pár tulajdonságai között szigorú (anti)korreláció van, ami a következőt jelenti. Ha mindkét fotont ugyanolyan polarizációs beállítású mérőberendezésen engedjük át, pl. vízszintes-függőleges, A jelű berendezésen, akkor ha az egyik foton vízszintesen polarizált, akkor a párja függőlegesen, vagy fordítva. Az A polarizátor két lehetséges sajátállapotát itt most $A+$ illetve $A-$ jellel fogjuk jelölni, a B polarizátorét pedig $B+$ illetve $B-$ jellel. Ugyanez igaz, ha egy tetszőleges más beállítású, de mindkét oldalon egyforma B berendezésen mérjük mindkét fotont. Azok polarizációja a B berendezés (operátor) szempontjából is mindig ellentétes irányú, ortogonális állapot. Ez az anti-korrelációs tulajdonság következik a fotonpár keltésének módjából is, amit alább részletezünk. Az ilyen tulajdonságú részecskepárokat EPR-pároknak is szokás nevezni.

A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen (EPR) 1935,
bizonyítják(?), hogy a kvantummechanika nem teljes
D. Bohm 1957



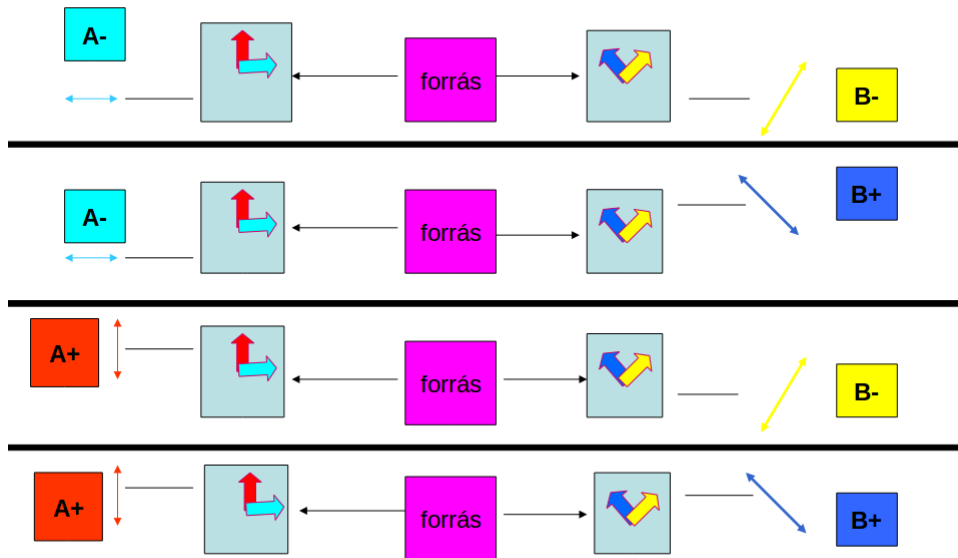
Szigorú korreláció van a két oldal eredményei között, ha ugyanolyan berendezés van mindkét oldalon.

28. ábra. Az A polarizátor két lehetséges sajátállapotát $A+$ illetve $A-$ jellel fogjuk jelölni, a B polarizátorét pedig $B+$ illetve $B-$ jellel.

Eszerint elegendő csak az egyik oldalon mérni. A pár másik tagjának enélkül is meg tudjuk mondani az állapotát, az tehát a méréstől függetlenül létezik, mondja EPR. Nem lehet, hogy a jobb oldalon azért mérünk $+$ -t, mert ezzel egyidőben mérve a bal oldali mérés eredménye $-$ volt, ugyanis a hatás terjedéséhez idő kell: ez a „lokális elve”, amit Einstein relativitáselmélete különösen hangsúlyoz. A nem mért foton polarizációja tehát a valóság egy eleme, mert azt annak mérése nélkül is egységnyi valószínűséggel meg lehet mondani.

Ennél még több is igaz, egy EPR-pár esetén a részecske állapotát egyszerre kétfajta (inkompatibilis) berendezés szempontjából is meg tudjuk mondani, ami a kvantummechanika szerint lehetetlen. Tegyük ugyanis két különböző berendezést a két oldalra:

Különböző berendezések a két oldalon



29. ábra.

Ha ekkor a bal oldali részecskén az A tulajdonságot (fizikai mennyiséget) mérjük, akkor tudjuk, hogy a jobb oldali párja az A szempontjából milyen állapotú, úi. éppen merőleges a bal oldalon mért irányra. Jobb oldalon viszont mérhetünk egy B beállítású berendezéssel, így megállapíthatjuk ennek az egyetlen részecskének mind az A , mind a B szempontjából a polarizációs tulajdonságait, s hasonlóan a párjának is a másik oldalon. Ezek a tulajdonságok tehát egyszerre meghatározottak egy-egy részecske esetén. A kvantummechanika viszont azt állítja, hogy egy adott beállítás (A fizikai mennyiség) szempontjából meghatározott állapotban lévő részecske egy másik beállítás (B fizikai mennyiség) szempontjából nem lehet meghatározott állapotban, ha A és B nem egyirányúak, amint az az ábrán látható (29). EPR szerint tehát a kvantummechanika nem ad számot a részecskét egyszerre jellemző két fizikai mennyiségről, tehát nem teljes. N. Bohr ezzel szemben azzal érvelt, hogy a két szétrepülő részecske egyetlen szétválaszthatatlan kvantumrendszert alkot (a ma használatos szóval *összefonódott állapotban* van) ezért az egyik részen történő beavatkozás, mérés, a másik oldal eredményét is azonnal befolyásolja, még ha a két rész távol is van egymástól. Ezt Einsein a lokális elvére hivatkozva nem tudta elfogadni, és a vita nem dőlt el.

A kérdés eldöntésére John Bell egy konkrét kísérleti elrendezést javasolt 1964-ben. Eszerint mérjük a két különböző irányba repülő részecskék esetén mindkettőre egymástól függetlenül háromféle fizikai mennyiséget, azaz háromféle lehetséges polarizációt, A -t, B -t és C -t, úgy hogy a polarizátorok beállítását minden fotonpárra véletlenszerűen választjuk. Kiderül, hogy ezáltal kísérletileg ellenőrizhető, hogy a kvantummechanika állítása a helyes, vagy az az Einstein féle elgondolás, hogy a részecskék egyszerre többféle irányú határozott polarizációval is kell, hogy rendelkezzenek. Az eredeti Bell-féle gondolatot itt egy egyszerű, Wigner Jenő által javasolt módon mutatjuk be.

John S. Bell (1928-1990)



30. ábra.

Tegyük föl, hogy a részecskepárok tagjainak már a mérés előtt, attól függetlenül mindhárom irányban meghatározott irányú $+$ vagy $-$ polarizációja van, és az ellentétes irányba repülő részecskének egy adott irány szempontjából mindig ellentétes a polarizációja. A lehetséges párok típusát a táblázat mutatja, ezek száma 8, és jelöljük egy konkrét méréssorozathoz a mért részecskepárok típusának számát N_k -val. Itt annyit írunk elő, hogy a pár két tagja minden adott irány szempontjából ellentétes polarizációjúak, ami kísérletileg így is van, ha mindkét oldalon ugyanazt a beállítást használjuk.

	bal oldalon			jobb oldalon		
	A	B	C	A	B	C
N_1	$+$	$+$	$+$	$-$	$-$	$-$
N_2	$+$	$+$	$-$	$-$	$-$	$+$
N_3	$+$	$-$	$+$	$-$	$+$	$-$
N_4	$+$	$-$	$-$	$-$	$+$	$+$
N_5	$-$	$+$	$+$	$+$	$-$	$-$
N_6	$-$	$+$	$-$	$+$	$-$	$+$
N_7	$-$	$-$	$+$	$+$	$+$	$-$
N_8	$-$	$-$	$-$	$+$	$+$	$+$

Tekintsük most azokat a párokat, amelyekre a balra repülő részecske $A+$, a jobbra repülő részecske $C+$ mérési eredményt ad. Ezek $N(A+, C+)$ száma a fenti táblázatból $N(A+, C+) = N_2 + N_4$. Hasonlóan azon párok száma, amelyekre bal oldalon $A+$ jobb oldalon $B+$ az eredmény $N(A+, B+) = N_3 + N_4$. Végül pedig azoké, amelyekre balra $B+$ jobbra $C+$ az eredmény, ez a szám $N(B+, C+) = N_2 + N_6$. Kapjuk, hogy

$$N(A+, C+) \leq N(A+, B+) + N(B+, C+). \quad (6.1)$$

Ezeknek a pároknak a számát meg lehet mérni, és a fenti egyenlőtlenséget össze lehet hasonlítani a kísérletek eredményével. Mielőtt ezt tovább elemeznénk, fogalmazzuk át a fenti eredményt valószínűségekre, hogy annak a kvantummechanikával való viszonyát föl tudjuk tárni.

Legyen $P(A+, C+)$ annak a valószínűsége, hogy egy véletlen választás során a bal oldali megfigyelő A irányba $+$ -t mér, s a párján a jobb oldali $C+$ -t stb. Ekkor nyilván

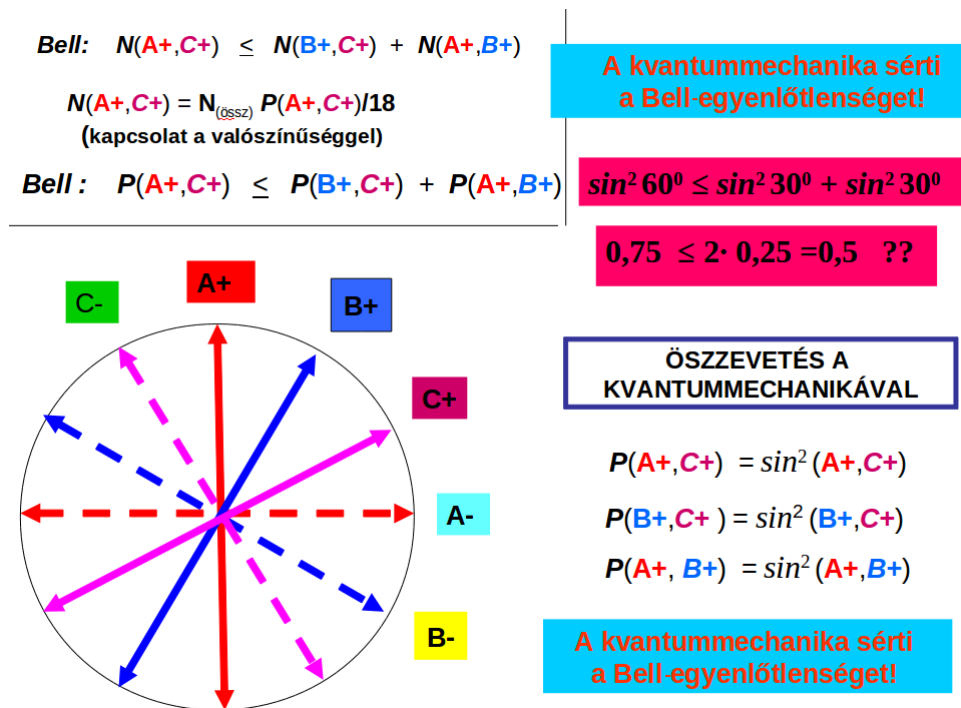
$$P(A+, C+) = \frac{N(A+, C+)}{\sum_{i=1}^8 N_i}$$

és hasonlóan a többi valószínűségre is $P(A+, B+) = \frac{N(A+, B+)}{\sum_{i=1}^8 N_i}$, $P(B+, C+) = \frac{N(B+, C+)}{\sum_{i=1}^8 N_i}$. Ezek alapján a (6.1) egyenlőtlenség a

$$P(A+, C+) \leq P(A+, B+) + P(B+, C+) \quad (6.2)$$

alakba írható. Ez egy Bell-egyenlőtlenség, amely nem a kvantummechanikán, hanem azon alapszik, hogy a részecskepároknak a mérés előtt már meghatározott tulajdonságai vannak.

Vizsgáljuk meg mit mond a fenti valószínűségekről a kvantummechanika, ahogyan az alábbi ábra mutatja. Egy valódi mérésnél egy-egy kristály van mindkét oldalon, és ezeket forgatjuk egymástól függetlenül véletlenszerűen az A , B és C irányba. Ha bal oldalon pl. $A+$ -t mérünk, akkor a párja a másik oldalon $A-$. Annak a valószínűségi amplitúdója tehát, hogy ez a másik részecske egy tetszőleges olyan $\hat{e}_\theta$ irányba polarizált, amely az $A-$ iránnyal θ szöget zár be $\cos \theta$. A megfelelő valószínűség tehát $\cos^2 \theta$. Vagy ha az $A+$ -al bezárt $\alpha = \pi/2 - \theta$ szöget használjuk ennek az $\hat{e}_\theta$ iránynak, akkor ez a valószínűség $\sin^2 \alpha$. Mivel mindkét oldalon egymástól függetlenül $1/3$ valószínűséggel választunk A -t, B -t vagy C -t, egy adott beállítás valószínűsége $1/9$. Annak a valószínűsége pedig, hogy a bal oldalon pl. $A+$ az eredmény amíg a jobb oldalon nem mérünk $1/2$, így az adott beállításnál pl. $P(A+, C+) = \frac{1}{18} \sin^2(A+, C+)$, ahol $(A+, C+)$ a két irány közötti szög.



31. ábra. A Bell-egyenlőtlenség sérülése

Válasszuk az ábrán mutatott speciális irányokat, azaz legyenek a kalcit kristályok, tehát a mérőberendezések A , B és C sajátirányai egymáshoz képest 30° -kal elfordítva. Vagyis legyen az $(A+, B+) = (B+, C+) = 30^\circ$ -os szög. Ekkor a megfelelő kvantummechanikai valószínűségeket kiszámítva az eredmény:

$$P(A+, C+) = \frac{1}{18} \sin^2 60^\circ, \quad P(A+, B+) = \frac{1}{18} \sin^2 30^\circ, \quad P(B+, C+) = \frac{1}{18} \sin^2 30^\circ. \quad (6.3)$$

írjuk be ezeket a valószínűségeket a (6.2) képletbe, s azt vesszük észre, hogy ezek az értékek nyilvánvalóan nem teljesítik (6.2) a Bell-egyenlőtlenséget, mert (6.2) szerint ehhez az kellene, hogy $\sin^2 60^\circ \leq 2 \sin^2 30^\circ$ teljesüljön. Azaz igaznak kellene lennie a

$$\frac{3}{4} \leq \frac{1}{2} \quad (6.4)$$

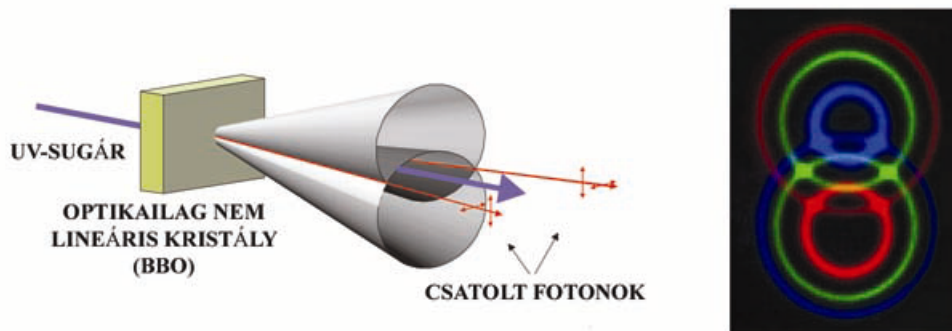
eredménynek, ami nyilvánvalóan hamis.

Ezek szerint alkalmas irányokat választva a polarizátoroknak a megfelelő kvantummechanikai valószínűségek sértik a Bell-egyenlőtlenséget. Így direkt kísérleti lehetőség nyílik annak megállapítására, hogy a kvantummechanika vagy a Bell-egyenlőtlenségek érvényesek. *A kísérletek szerint, amelyek közvetlenül a fenti $N(A+, C+)$ stb. mennyiségeket mérik, a Bell-egyenlőtlenség alkalmasan választott A , B , és C irányok esetén nem érvényes, viszont érvényesnek bizonyulnak a kvantummechanika által jóslott eredmények.*

Mindez azt jelenti, hogy vagy a méréstől függetlenül még a mérés előtt egyszerre létező tulajdonságok föltételezése nem igaz, vagy pedig létezik egy nemlokális kommunikáció a pár két tagja között, azaz az egyik részecskeállapot azért lesz olyan amilyen, mert a párján, tőle messze, akár *térszerűen* elválasztott eseményként (ld. relativitáselmélet) valamilyen adott eredményt mérünk. (Meg lehet azonban mutatni, hogy ennek ellenére információt a két mérési hely között ilyen módon nem lehet továbbítani, ebből a szempontból tehát a lokalitási elv nem sérül.) Mindkét előbbi állítás ellentmond a természetről alkotott hagyományos fölfogásnak. Az első esetben annak, hogy egy részecske esetén, az azt jellemző minden mennyiségnek – tehát az inkompatibilis mennyiségeknek is – a mérés előtt, attól függetlenül egyszerre van meghatározott értéke. Ezt a föltételezést néha szokás realizmusnak nevezni. A második esetben a lokalitásnak mond ellent, abban az értelemben, hogy egy részecskén végzett valamilyen mérés eredménye *pillanatszerűen* befolyásolja a mérés helyétől távol lévő párján elvégzett mérés eredményét.

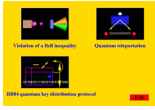
A Bell-egyenlőtlenség teljesülésére, illetve sérülésére vonatkozó első kísérletet J. F. Clauser és munkatársai végezték 1972-ben. Egy későbbi A. Aspect nevéhez fűződő (1982) kísérlet volt az első, ahol a fotonpár keletkezését követően a mérőberendezések (kristályok) beállítását a különböző lehetséges irányokba úgy végezték, hogy ez a két esemény térszerűen elválasztott legyen, vagyis az egyik kristály beállításakor induló képzeletbeli fényjel nem érhetette el a másik kristályt annak beállítása előtt.

Itt röviden az A. Zeilinger által megvalósított (1995) kísérleti elrendezés vázlatát mutatjuk be, amelynél az összefonódott fotonpár egy nemlineáris kristályban keletkezik.



32. ábra. Összefonódott fotonpár keltése

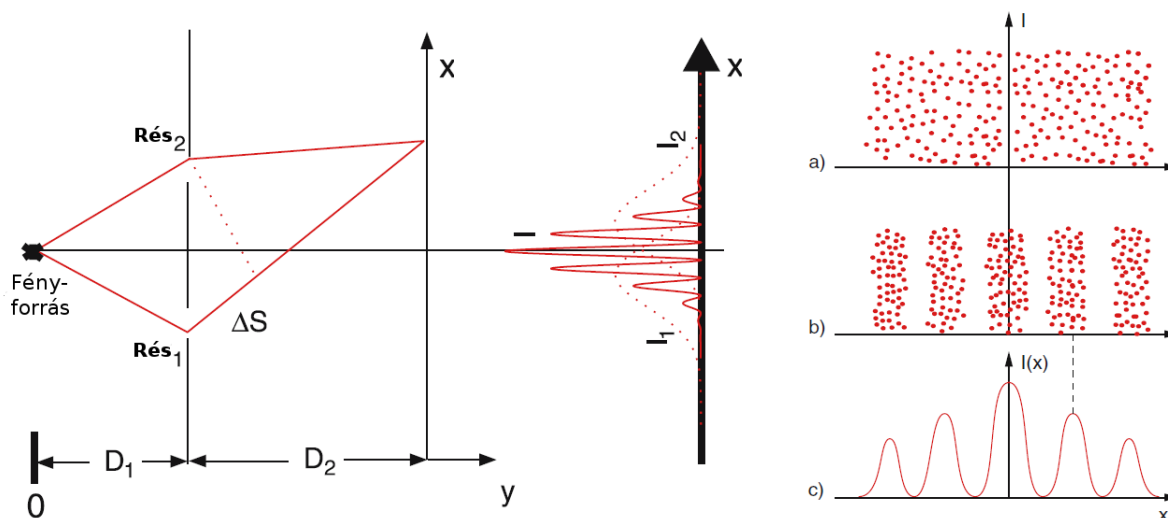
A 351 nm-es ultraibolya lézerefény fotonjait a nemlineáris kristály két kisebb energiájú fotonra hasítja. Ezt a folyamatot a nemlineáris optikában parametrikus lekonvertálásnak nevezzük. Az így keletkező fénysugarak két egymást metsző kúp palástja mentén távoznak a kristályból, a fotonokra vonatkozó energia és impulzusmegmaradásnak megfelelően. A keletkező másodlagos fotonpárok közt lesznek olyanok, amelyeknél a pár két tagjának frekvenciája, illetve hullámhossza azonos, 702 nm (ezt degenerált esetnek nevezzük), de a polarizációs irányuk mindig ellentétes. Ez utóbbiak esetén a két kúp nyílásszöge azonos, és a kúpok két metszészvonala mentén – a jobb oldali szimulált ábrán a két zöld foltnál – kijövő fotonpárok éppen a kívánt tulajdonságúak. (Az ábrán a színek fiktívek, a zöld szín a valóban 702 nm-es infravörös fotonok kilépési kúpjait jelzi.)

BELL-EGYENLŐTLENSÉG ÉS BB84-PROTOKOLL		
		Az exe fájlt letöltve és futtatva több szimuláció közül is választhatunk. Az első ezek közül a Bell-egyenlőtlenség sérülését demonstrálja. A második – az álltalunk itt nem tárgyalt – kvantumos teleportációt mutatja be. A harmadik pedig a BB84 kvantumos kulcs továbbítási (QKD) protokollt szemlélteti.

A kísérletek egyöntetűen a kvantummechanikai eredmény helyességét és a Bell-egyenlőtlenség sérülését igazolták.

7. Kétréses kísérlet, hullámfüggvény

Ebben a szakaszban a részecske térbeli helyzetének jellemzésével foglalkozunk. Egy alapvető kísérlet ezzel kapcsolatban, amit Thomas Young végzett el először fénnel 1803-ban. Egy fényforrással szemben egy ernyőn két nyílás van, amelyeken keresztül a fény egy további ernyőre jut, ahol *interferenciakép* keletkezik. A jelenség hasonló ahhoz, amit vízhullámoknál is megfigyelhetünk, ha egy hullámkádban lévő gát két kis nyílásán engedjük át a gát mögül érkező vízhullámokat. Így a Young-féle kísérlet fontos bizonyítéka volt annak a hipotézisnek, hogy a fény hullámtermészetű. Ugyanilyen kísérletet azonban el lehet végezni véges tömegű részecskékkal pl. elektronokkal, sőt annál jóval nagyobb atomokkal, még molekulákkal is, és az interferenciakép szintén kialakul. Részletesebben megnézve azonban az derül ki, hogy a kép egyedi, lényegében pontszerű becsapódások összességéként alakul ki, amint az a 34. ábrason látható, nem úgy mint pl. vízhullámoknál.

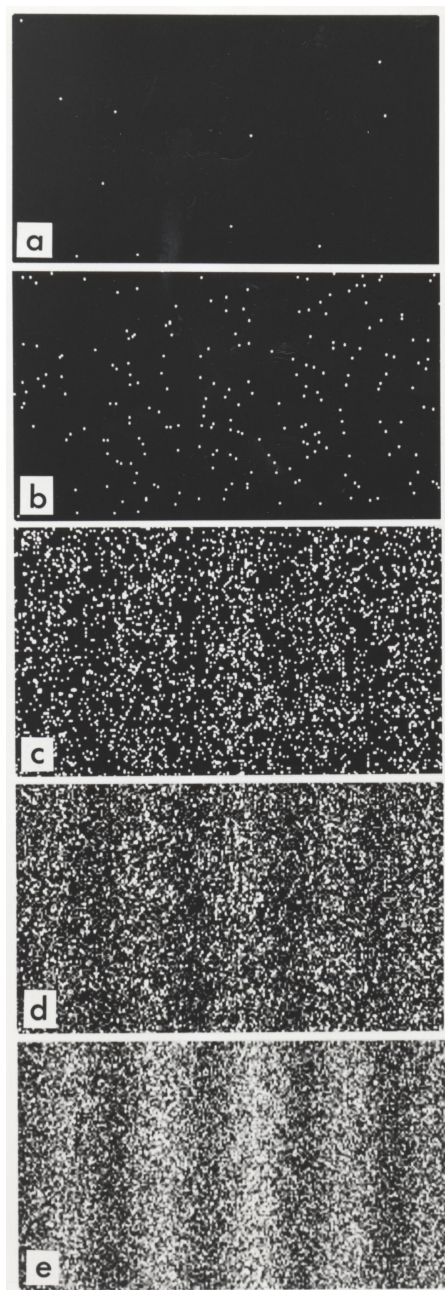


33. ábra. Young-féle kétréses kísérlet

A 34. ábrán látható kísérletet először Jönsson végezte el 1959-ben. A kísérlet leghíresebb változatát, amelynek animációját alább láthatjuk, pedig A. Tonomura végezte.

JÖNSSON-TONOMURA-KÍSÉRLET		
		A Tonomura-kísérlet animációján láthatjuk, hogy az elektronokkal végzett kétréses kísérletben az inteferenciakép lényegében pontszerű becsapódások összességéként alakul ki.

Ezt a rendkívül meglepő jelenséget most az előző szakaszban megismert formalizmus segítségével, a kvantummechanika valószínűségi amplitúdóinak fogalmával fogjuk értelmezni. A részecske



34. ábra. Kétréses kísérlet eredménye elektronokkal. Az a, b, c, d, e ábrák egyre hosszabb expozíciós idővel mutatják a felfogó ernyőn az elektronok érkezését. Látható, hogy az interferenciakép egyedi becsapódások eredménye. Ez teszi szükségessé a kvantumos részecskék hullámtermészetének valószínűségi értelmezését.

ernyőre való érkezési pontjának csak az egyik koordinátáját vizsgáljuk, legyen ez az x koordináta, amely merőleges az ábrán látható csíkokra. Ahhoz a jelenséghez, hogy az eredetileg valamilyen ψ állapotban lévő részecskét az x helyen regisztrálunk, egy $\langle x|\psi \rangle$ komplex számot, valószínűségi amplitúdót rendelünk. Ezek összességét tekintve, most nem egy számsorozatot kapunk, hanem egy x -től függő függvényt:

$$\langle x|\psi \rangle = \psi(x), \quad (7.1)$$

amely a ψ állapot jellemzésére használható, és *hullámfüggvénynek* nevezzük. Az elnevezés okát alább részletesen indokoljuk. A részecske megtalálási valószínűsége az ernyőn a valószínűségi amplitúdó abszolút értékének a négyzete:

$$|\langle x|\psi \rangle|^2 = |\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x) =: \rho(x) \geq 0. \quad (7.2)$$

A részecske megfigyelt koordinátája egy folytonos valószínűségi változó, ennek *valószínűségi sűrűségfüggvénye* $\rho(x)$. Ez azt jelenti, hogy annak a valószínűsége, hogy a ψ állapotú részecskét egy olyan x helyen regisztráljuk, amelyre $x_1 < x < x_2$:

$$P(x_1 < x < x_2) = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx = \int_{x_1}^{x_2} \rho(x) dx, \quad (7.3)$$

ami tetszőleges $x_1 < x_2$ által meghatározott intervallumra érvényes. Mivel az, hogy a részecskét valahol regisztráljuk a biztos esemény, így:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (7.4)$$

Ennek alapján egy részecskét jellemző állapothoz tartozó hullámfüggvényről azt kell előírunk, hogy az abszolút értékének négyzetét integrálva $-\infty$ és ∞ között az eredmény 1 legyen.

A 34. ábrán látható interferenciakép a föntiek és az előző szakaszban látott technikával a következőképpen magyarázható. Az eredetileg ψ állapotban lévő részecske beérkezhet az első réshez az első ernyőn, ahol is az állapotát jelöljük φ_1 -el. Az ehhez rendelt amplitúdó $\langle \varphi_1|\psi \rangle$. Ezután továbbhaladva regisztráljuk a hátsó ernyőn az x helyen. A utóbbi folyamathoz rendelt amplitúdó $\langle x|\varphi_1 \rangle$. Ahhoz a részfolyamathoz, hogy a részecske az 1. résen érkezik az x helyre, a teljes amplitúdó $\langle x|\varphi_1 \rangle \langle \varphi_1|\psi \rangle$. Hasonlóan, annak az amplitúdója, hogy ugyanez a 2. résen áthaladva történik $\langle x|\varphi_2 \rangle \langle \varphi_2|\psi \rangle$. A teljes amplitúdó a két lehetőség összege:

$$\langle x|\psi \rangle = \langle x|\varphi_1 \rangle \langle \varphi_1|\psi \rangle + \langle x|\varphi_2 \rangle \langle \varphi_2|\psi \rangle, \text{ azaz} \quad (7.5)$$

$$\psi(x) = \varphi_1(x) \langle \varphi_1|\psi \rangle + \varphi_2(x) \langle \varphi_2|\psi \rangle = c_1 \varphi_1(x) + c_2 \varphi_2(x), \quad (7.6)$$

ahol $c_1 = \langle \varphi_1|\psi \rangle$, $c_2 = \langle \varphi_2|\psi \rangle$. Ez utóbbiakat azért jelöltük így mert a rés kiterjedését kicsinek tekintjük, s így a résbe érkezés amplitúdóját egyetlen számmal jellemezzük. A szuperpozíció eredménye a két lehetőség interferenciája. A részecske x helyen való megtalálásának valószínűségi sűrűségét a négyzetre emelés után kapjuk:

$$|\psi(x)|^2 = |c_1 \varphi_1(x) + c_2 \varphi_2(x)|^2 = |c_1 \varphi_1(x)|^2 + |c_2 \varphi_2(x)|^2 + 2 \operatorname{Re}(c_1^* c_2 \varphi_1^*(x) \varphi_2(x)). \quad (7.7)$$

Az interferencia az utolsó tag miatt lép föl. Lesznek helyek ahová kis valószínűséggel érkezik a részecske, ezek a sötét csíkok a végső ábrán, és lesznek olyanok, ahová gyakran csapódnak. A kvantummechanika megadja a fönti $\varphi_1(x)$ és $\varphi_2(x)$ konkrét alakját is, de ezzel itt most nem foglalkozunk.

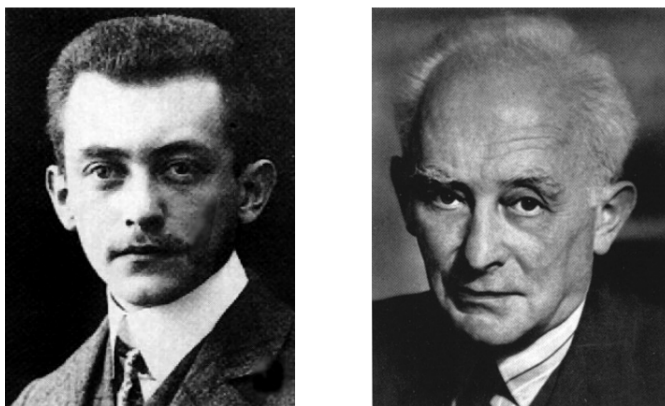
Nem hangsúlyoztuk eddig, de a hullámfüggvény általában az időtől is függ, ilyenkor a jelölésére egy nagy görög betűt fogunk használni: $\Psi(x, t)$. Milyen lehet egy konkrét esetben ez a függvény? Ez függ a kérdéses fizikai szituációtól, általában csak annyi van előírva, hogy legyen négyzetesen integrálható, és a teljes x tengely mentén vett integrálja legyen 1, a t változó tetszőleges értékénél, annak

megfelelően, hogy $|\Psi(x, t)|^2$ a részecske helyzetének valószínűségi sűrűségfüggvénye a t időpontban. A hullámfüggvénynek ez az értelmezése Max Born nevéhez fűződik. Ennek megfelelően:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (7.8)$$

tetszőleges időpontban. Azt mondjuk ilyenkor, hogy a függvényünk 1-re normált. Ezt a követelményünket a későbbiekben majd még finomítjuk. Ha a részecske helyét nem egy egyenes mentén akarjuk megadni, hanem a háromdimenziós térben, akkor a hullámfüggvény az x helyett mindhárom térkoordinátától függ: $\Psi(x, y, z, t) = \Psi(\mathbf{r}, t)$ azaz a részecske helyvektora lesz a valószínűségi változó, aminek sűrűségfüggvénye ekkor $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$, amelyre előírjuk a normálást három dimenzióban.

Max Born (1882-1970)



35. ábra.

Visszatérve egyelőre az egydimenziós esetre, ilyen függvény pl. egy rögzített időpillanatban a $\psi(x) = \mathcal{N}e^{-x^2/4\sigma_0^2}$, ahol σ_0 az x koordinátától független állandó, $\mathcal{N}$ pedig egy úgynevezett normálási tényező, amelyet úgy kell megválasztani, hogy a négyzetintegrál 1 legyen. Az ehhez tartozó valószínűségi sűrűségfüggvény $|\psi(x)|^2 =: \rho(x) = \mathcal{N}^2 e^{-x^2/2\sigma_0^2}$. A valószínűségszámításból ismert, hogy ez az $x = 0$ pont körül centrált standard normális eloszlás sűrűségfüggvénye, amelyet gyakran használunk az $x = 0$ hely környezetébe lokalizált részecske leírására. Az előzőek szerint a függvény általában azonban függhet az időtől is, pl. úgy, hogy a σ_0 helyett egy időtől függő $\sigma(t)$ szerepel benne, ekkor persze az $\mathcal{N}$ is függ az időtől. Sokféle más időfüggés is lehetséges, ami a vizsgált konkrét fizikai problémától függ. Egy ilyen időfüggő hullámfüggvény látható itt.

A későbbiekben majd részletesen foglalkozunk azzal a kérdéssel, hogy konkrét fizikai szituációban, például adott erő hatása alatt, hogyan változik egy részecske állapota, azaz az állapotot meghatározó hullámfüggvény.

8. De Broglie-hullámok, szabad részecske Schrödinger-egyenlete

Amint azt a 7. szakaszban láttuk, ha egy részecske helyét vizsgáljuk a térben, és meg akarjuk adni, hogy az milyen $|\psi\rangle$ állapotban van, akkor annak az amplitúdóját adjuk meg, hogy a részecskét az x helyen találjuk, ez a $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$ (általában komplex) hullámfüggvény. (Itt egy dimenzióra szorítkozunk, a teljes térbeli megtalálási valószínűség amplitúdója a $\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$ háromváltozós függvény.) Az állapot, illetve a $\psi(x)$ amplitúdó természetesen általában időben is változik, ezt a későbbiekben részletesen taglaljuk. A $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$ képlet a $c_j = \langle \varphi_j | \psi \rangle$ képlet folytonos megfelelője. A $\psi(x)$ -ről azt mondjuk, hogy a $|\psi\rangle$ állapotot *koordinátareprezentációban* adjuk meg. Megjegyezzük azonban, hogy egy részecske térbeli, vagy itt egy egyenes menti kvantumoz mozgása esetén

is létezik *megszámlálható* sok olyan $|\varphi_k\rangle$ állapotból álló ortonormált bázis, amellyel $|\psi\rangle$ kifejtethető: $|\psi\rangle = \sum_k c_k |\varphi_k\rangle$. Képezve mindkét oldal hullámfüggvényét az $\langle x|$ -el való szorzással az

$$\langle x|\psi\rangle = \sum_k c_k \langle x|\varphi_k\rangle, \quad (8.1)$$

azaz a

$$\psi(x) = \sum_k c_k \varphi_k(x) \quad (8.2)$$

kifejtést kapjuk, ami az $\varphi_k(x)$ függvényrendszer szerinti kifejtést jelenti.

Ha adott a $\psi(x)$ és $\varphi(x)$ hullámfüggvény, akkor a $\langle\psi|\varphi\rangle$ amplitúdó a kvantummechanika szabályai szerint a

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int \psi^*(x)\varphi(x)dx \quad (8.3)$$

integrállal számítható ki. Eszerint az $|\varphi_k\rangle$ bázisállapotok ortonormált volta a

$$\langle\varphi_j|\varphi_k\rangle = \int \varphi_j^*(x)\varphi_k(x)dx = \delta_{jk} \quad (8.4)$$

egyenlőséget jelenti, vagyis a $\varphi_k(x)$ -ek négyzetesen integrálható függvények. Ez utóbbi szerint a kifejtési együtthatót meghatározó $c_j = \langle\varphi_j|\psi\rangle$ együtthatónak a

$$c_j = \int \varphi_j^*(x)\psi(x)dx \quad (8.5)$$

formulával való kiszámíthatósága következik. A $|\varphi_k\rangle$ megszámlálható sok báziselem létezése tehát azt jelenti, hogy létezik olyan megszámlálható sok $\varphi_k(x)$ négyzetesen integrálható függvény, amelyek segítségével a szintén négyzetesen integrálható – egyébként tetszőleges – $\psi(x)$ függvény kifejtethető.

Előfordul azonban, hogy egy $\psi(x)$ függvényre olyan kifejtést alkalmazunk, ahol a kifejtésre használt függvényrendszer nem diszkrét, hanem folytonosan sok elemből áll. Erre látunk egy fontos példát az alábbiakban.

8.1. A de Broglie-féle hullám

A hullámfüggvény egy fontosnak bizonyuló első konkrét alakját Louis de Broglie írta föl 1924-ben. De Broglie a fotonok energiájára és impulzusára vonatkozó Einstein által javasolt képleteket – amelyeket a 2. szakaszban tárgyaltunk – véges nyugalmi tömegű részecskére pl. az elektronra is kiterjesztette, de éppen fordított irányban járt el, mint Einstein. Nem a hullámhoz rendelt részecskét, hanem a részecskéhez hullámot.

Louis de Broglie (1892 – 1987)



36. ábra.

Ennek a de Broglie-hullámnak a hullámszáma az x tengely mentén haladó, adott p impulzusú és ε energiájú szabad részecske esetén $k = p/\hbar$, frekvenciája pedig $\omega = \varepsilon/\hbar$. Így a hullámfüggvény alakja:

$$\Psi_p(x, t) = Ce^{i(kx - \omega t)} = Ce^{i(px/\hbar - \varepsilon t/\hbar)}, \quad (8.6)$$

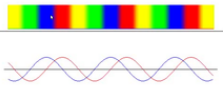
ahol C egy állandó, amelyet $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ -nak választunk. E választás okát az alábbiakban látjuk majd. A p index arra utal, hogy ez a függvény konkrétan egy határozott p impulzusú részecskét ír le. Mivel egy erőmentes, m tömegű nemrelativisztikus részecske esetén $\varepsilon = p^2/2m$, a fenti hullámot az

$$\Psi_p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i(px - \frac{p^2}{2m}t)/\hbar} \quad (8.7)$$

alakba is írhatjuk. Megjegyezzük, hogy ebből az következik, hogy egy tömeggel rendelkező részecskére $\omega \neq kc$, hanem $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$.

Mélyebben is meg lehet alapozni, hogy egy p impulzusú állapot amplitúdója éppen a fenti $\Psi_p(x, t)$, de itt egyelőre megelégszünk ennek a ténynek a kimondásával.

A $\Psi_p(x, t)$ függvény viszont nem négyzetesen integrálható, hiszen $|\Psi_p(x, t)|^2 = |C|^2$ minden x -re állandó, s ez az előzőekben mondottak szerint azt jelzi, hogy szigorúan véve ilyen állapot nem is létezik. Ennek a problémának a megoldását a következő alpontban elemezzük.

EGY DE BROGLIE-HULLÁM		
		Az animáció egyetlen de Broglie-hullám (8.7) időbeli változását mutatja. Az ábra felső részén a színes sáv magassága a hullámfüggvény abszolút értékét mutatja térben és időben. A (8.7) képlet szerint ez mind térben, mind időben állandó. A hullám fázisának értékét egy adott helyen és időben egy alkalmas színskód segítségével jelezzük. Az ábra alsó részén pedig a hullámfüggvény valós részét (kék) és képzetes részét (piros) láthatjuk.

8.2. A szabad részecske Schrödinger-egyenlete

Schrödinger olyan differenciálegyenletet keresett, amelynek a $\Psi_p(x, t)$ függvény megoldása, továbbá olyat, amely időben elsőrendű. Az egyenlet alakja a következő:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_p}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_p}{\partial x^2}, \quad (8.8)$$

amelyet a *szabad részecske Schrödinger-egyenletének* nevezünk. Most megmutatjuk, hogy $\Psi_p(x, t)$ kielégíti a fenti egyenletet. Felhasználva, hogy

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_p}{\partial t} = \varepsilon \Psi_p, \quad \frac{\partial \Psi_p}{\partial x} = \frac{ip}{\hbar} \Psi_p, \quad \frac{\partial^2 \Psi_p}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi_p, \quad (8.9)$$

amiből látszik, hogy a (8.8) egyenlet fönnáll, ha figyelembe vesszük, hogy $\varepsilon = p^2/2m$. Fölhívjuk már itt a figyelmet arra, hogy a középső képlet szerint, a de Broglie-hullám esetén

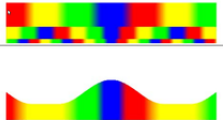
$$-i\hbar \frac{\partial \Psi_p}{\partial x} = p \Psi_p \quad (8.10)$$

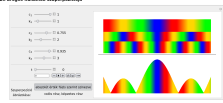
azaz a Ψ_p deriváltjának $-i\hbar$ -szorosa a Ψ_p -nek éppen a p -szereése. A de Broglie-hullám alakja adott – mondjuk $t = 0$ – időpontban $\Psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ikx}$.

Ám mostantól nem a de Broglie-hullám alakját tekintjük alapvetőnek, hanem magát a (8.8) egyenletet, és megnézzük, hogy milyen egyéb megoldásai lehetnek ennek az egyenletnek. Az egyenlet linearitása miatt ennek megoldása lesz de Broglie-féle hullámok bármely

$$\sum_j C_j e^{i(p_j x - \varepsilon_j t)/\hbar} \quad (8.11)$$

alakú véges vagy végtelen szuperpozíciója is, különböző C_j együtthatókkal, ha minden tagban érvényes, hogy $\varepsilon_j = p_j^2/2m$. Egy ilyen összeg esetén azonban már nem beszélhetünk meghatározott impulzusú állapotról, tehát egy de Broglie-féle hullámról, mert láthatólag sok különböző p_j szerepel benne. Ugyanakkor a fönti diszkrét végtelen összeg sem négyzetesen integrálható.

HÁROM DE BROGLIE-HULLÁM SZUPERPOZÍCIÓJA		
		Az animáció felső részén az egyes hullámfüggvények abszolút értéke látható a fázis szerint színezve. Az alsó rész a fönti három de Broglie-hullám (8.7) szuperpozíciójának időbeli változását mutatja a fázis szerint színezve.

DE BROGLIE-HULLÁMOK SZUPERPOZÍCIÓJA		
		Az ábra felső fele három de Broglie-hullámot (8.7) mutat: mindegyiket egy legfeljebb egységnyi magasságú színes sávval ábrázoljuk. A sáv magassága az amplitúdóval arányos, a színezés pedig a fázist jelöli. Az egyes de Broglie-hullámok amplitúdóját és hullámszámát a bal oldali manipulátorokkal állíthatjuk be. Az ábra alsó fele a három de Broglie-hullám szuperpozícióját mutatja.

A szabad részecskére vonatkozó Schrödinger-egyenletnek *négyzetesen integrálható megoldását* kaphatjuk viszont, ha de Broglie-hullámok folytonos összegét, azaz integrálját tekintjük, diszkrét C_j -k helyett egy megfelelő $C(p)$ valós változós függvénnyel:

$$\Psi(x, t) = \int C(p) e^{i(px - Et)/\hbar} dp = \int C(p) e^{i(px - p^2 t/2m)/\hbar} dp. \quad (8.12)$$

Írjuk a továbbiakban a $C(p)$ függvényt $C(p) = \tilde{\psi}(p)/\sqrt{2\pi\hbar}$ alakba, aminek célszerűségéről alább meg fogunk győződni. Így a szabad részecske Schrödinger-egyenletének legáltalánosabb megoldásai a

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\psi}(p) e^{i(px - p^2 t/2m)/\hbar} dp \quad (8.13)$$

alakú függvények. Egy-egy konkrét megoldást, amelyekhez valamilyen megadott kezdeti állapotból induló hullámfüggvény tartozik, az itt egyelőre nem konkretizált $\tilde{\psi}(p)$ függvénnyel szabhatunk meg. Mint alább látni fogjuk, ez a $\Psi(x, t)$ négyzetesen integrálható és emellett 1-re normált lesz, ha a $\tilde{\psi}(p)$ -re is éppen a $\int |\tilde{\psi}(p)|^2 dp = 1$ feltételt írjuk elő.

Az alábbiakban egy adott időpillanatban, célszerűen a $t = 0$ időpontban, vizsgáljuk a $\Psi(x, 0) = \psi(x)$ függvényt. Ez utóbbi a

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\psi}(p) e^{ipx/\hbar} dp \quad (8.14)$$

alakú. Integrálás itt is a $(-\infty, \infty)$ intervallumra történik, de azt most sem írjuk ki. Ráismerünk, hogy a (8.14) formula lényegében éppen a $\tilde{\psi}(p)$ függvény Fourier-transzformáltja, vagy más szóval a $\psi(x)$ függvény Fourier előállítása. A matematikából ismert, hogy adott *négyzetesen integrálható* $\psi(x)$ esetén azt a $\tilde{\psi}(p)$ függvényt, amelyikkel éppen az adott $\psi(x)$ -et állítjuk elő a fönti szuperpozícióval a

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx \quad (8.15)$$

formulával számíthatjuk ki. Ez az inverz Fourier-transzformáció. Ismert továbbá a Fourier-transzformáltakra vonatkozó Parseval-Plancherel-tétel, mely szerint, ha a $\tilde{\psi}(p)$ négyzetesen integrálható, akkor $\psi(x)$ is az, továbbá, ha

$$\int |\tilde{\psi}(p)|^2 dp = 1, \quad \text{akkor} \quad \int |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (8.16)$$

Lássuk ennek igazolását:

$$\begin{aligned}
1 &= \int \tilde{\psi}^*(p) \tilde{\psi}(p) dp = \int \tilde{\psi}^*(p) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx \right) dp = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) \left(\int \tilde{\psi}^*(p) e^{-ipx/\hbar} dp \right) dx = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) \sqrt{2\pi\hbar} \psi^*(x) dx = \int \psi(x) \psi^*(x) dx,
\end{aligned} \tag{8.17}$$

ahol föltételeztük, hogy az x és p szerinti integrálás sorrendje fölcserélhető.

Látható, hogy az integrálok létezésén túl a $\tilde{\psi}(p)$ -nek és vele együtt a $\psi(x)$ -nek éppen 1-re való normáltságát az biztosítja, hogy az (8.14) és (8.15) képletekben is az $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ tényezőt használjuk.

8.1 Feladat: Tekintsük a $\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + i\frac{p_0}{\hbar}x}$ Gauss-típusú hullámfüggvényt.

- a) Ellenőrizzük, hogy $\psi_0(x)$ valóban normált.
b) Számítsuk ki a $\psi_0(p)$ függvényt.

Látható, hogy egy adott pillanatban a $\psi(x)$ helyett azzal egyenértékűen a $\tilde{\psi}(p)$ is használható az állapot leírására. A (8.13) vagy a (8.14) képletek szerint a $\tilde{\psi}(p)$ függvény annak a mértékét határozza meg, hogy egy adott p impulzusnak megfelelő $e^{ipx/\hbar}$ alakú hullám mekkora arányban, vagyis – a már használt terminológia szerint – milyen *amplitúdóval* szerepel az adott állapotban, amelyet eddig a $\psi(x)$ függvénnyel adtunk meg. Ennek megfelelően annak a *valószínűségi sűrűségét*, hogy a kérdéses állapotban a részecske impulzusa éppen p a

$$\varrho(p) = |\tilde{\psi}(p)|^2 \tag{8.18}$$

függvény adja meg, és a (8.16) tétel szerint ez a függvény is normált, ahogyan annak lennie is kell.

Rámutatunk itt arra is, hogy a korábbi írásmódot alkalmazva, annak az amplitúdóját, hogy a ψ állapotú részecske impulzusát mérve azt éppen p -nek találjuk $\langle p|\psi \rangle$ -vel jelöljük. Ez utóbbi nyilván azonos a $\tilde{\psi}(p)$ -vel, azaz

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi \rangle. \tag{8.19}$$

Másképpen, annak az amplitúdója, hogy az adott p impulzussal bíró részecske az x helyen található $\langle x|p \rangle$. Mivel ez de Broglie szerint éppen $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$, így

$$\langle x|p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}. \tag{8.20}$$

9. Az egydimenziós mozgás Schrödinger-egyenlete

Az előbbieken láttuk, hogy a szabad részecske hullámfüggvénye (valószínűségi amplitúdója) eleget tesz az $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$ egyenletnek. Az egyenlet általánosabb alakja, egy $V(x)$ potenciáltérben mozgó részecske Schrödinger-egyenlete:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t). \tag{9.1}$$

A kvantummechanikában ez lép a Newton-féle $m\ddot{x} = F(x)$ egyenlet helyébe abban az esetben, ha az erő konzervatív $F(x) = -\frac{\partial}{\partial x} V(x)$. A (9.1) egyenletet, illetve annak később bevezetendő általánosabb alakját a kvantummechanikában ugyanúgy posztulátumként tekintjük, mint a klasszikus mechanika Newton-egyenletét. Ez a kvantummechanikai mozgásegyenlet, mert ez határozza meg a részecske állapotának időbeli változását adott külső potenciális energia, azaz adott külső erő esetén. Az egyenlet matematikai szempontból egy időben elsőrendű, de az x koordinátában másodrendű

parciális differenciálegyenlet, amelynek megoldása jóval bonyolultabb, mint a megfelelő potenciáltérben mozgó klasszikus mechanikai részecske mozgásegyenlete. Ez utóbbi ugyanis egyetlen *közönséges* másodrendű differenciálegyenlet, vagy a kanonikus formalizmusban (Hamiltoni-mechanika) két elsőrendű differenciálegyenlet. A kvantummechanikai feladat már egyetlen részecske egydimenziós mozgása esetén is bonyolult, de még komplikáltabb a helyzet, ha a mozgás háromdimenziós vagy egyszerre több részecskét is vizsgálunk, ezért egyelőre csak az előbbi esetre szorítkozunk.

Erwin Schrödinger (1887-1961)



37. ábra.

9.1. Kvantumos kauzalitás

A (9.1) egyenlet fontos tulajdonsága, hogy időben elsőrendű. Emiatt, ha megadjuk a $\Psi(x, t = 0) = \psi(x)$ függvényt mint kezdeti értéket, akkor ennek alapján az egyenlet megoldásával megkaphatjuk, hogy milyen lesz az állapot később, azaz hogyan változik időben a $\Psi(x, t)$ függvény. Ez a kvantumos kauzalitás, amely szerint egy korábbi állapotból következik a későbbi. Hangsúlyozzuk azonban, hogy valamely fizikai mennyiség mérése szempontjából általában mind a kezdő, mind a későbbi állapot csak valószínűségi információt tartalmaz.

9.2. Linearitás

Egy további lényeges tulajdonság, hogy a (9.1) egyenlet lineáris, azaz az ismeretlen függvény és annak deriváltjai is csak az első hatványon szerepelnek benne. Emiatt ha $\Psi_1(x, t)$ és $\Psi_2(x, t)$ a Schrödinger-egyenlet egy-egy megoldása valamilyen $\Psi_1(x, t = 0) = \psi_1(x)$ illetve $\Psi_2(x, t = 0) = \psi_2(x)$ kezdeti értékekhez, akkor megoldás lesz a

$$\Psi(x, t) = c_1 \Psi_1(x, t) + c_2 \Psi_2(x, t) \quad (9.2)$$

alakú függvény is, ahol ebben a lineáris kombinációban c_1 és c_2 tetszőleges komplex számok.

9.1 Feladat: Igazoljuk, hogy a (9.2) lineáris kombináció valóban megoldása a Schrödinger-egyenletnek.

A lineáris kombináció állhat természetesen több, akár végtelen sok tagból is. Ezen tulajdonság szempontjából viszont a Schrödinger-egyenlet egyszerűbb, mint a klasszikus mechanikai egyenletek, mert ott a mozgásegyenlet (néhány ritka kivételtől eltekintve) általában nem lineáris, a klasszikus mechanikában két különböző kezdeti feltételhez tartozó megoldás ilyen típusú szuperpozíciója már nem lesz megoldás.

9.3. A valószínűség megmaradása, a kontinuitási egyenlet

Egy harmadik fontos tulajdonsága adódik a Schrödinger-egyenletnek, ha megvizsgáljuk a

$$|\Psi(x, t)|^2 = \rho(x, t) \quad (9.3)$$

függvényt, amely a részecske x tengely menti valószínűsége. Emiatt a

$$\int \rho(x, t) dx = \int |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (9.4)$$

normáltsági föltételnek minden időpillanatban teljesülnie kell. Megmutatjuk, hogy a Schrödinger-egyenletből következik, hogy ezt elegendő a $t = 0$ -ra megkövetelni, abból már következik, hogy az integrál mindig 1.

Ehhez szorozzuk meg (9.1)-t a komplex konjugáltjával, illetve vegyük az így kapott egyenlet komplex konjugáltját:

$$i\hbar\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi^*\Psi, \quad (9.5)$$

$$-i\hbar\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2} + V(x)\Psi^*\Psi. \quad (9.6)$$

A két egyenlet különbsége osztva $i\hbar$ -val :

$$\begin{aligned} \frac{\partial|\Psi|^2}{\partial t} &= -\frac{\hbar}{2im}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\right) = -\frac{\hbar}{2mi}\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right) = \\ &= -\frac{\partial}{\partial x}\frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right). \end{aligned} \quad (9.7)$$

A jobb oldalon szereplő

$$\frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right) = j \quad (9.8)$$

mennyiség neve valószínűségi áram (fluxus), s így egy

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0 \quad (9.9)$$

kontinuitási egyenletet kapunk. Ennek az egyenletnek az integrálja, tetszőleges rögzített intervallumra:

$$\int_a^b \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)|^2 dx = \frac{d}{dt} \int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx = -(j(b) - j(a)). \quad (9.10)$$

Az $[a, b]$ intervallumon belül való tartózkodás valószínűsége az a helyen a pozitív x irányban befolyó és a b helyen a pozitív x irányban kifolyó valószínűség különbségével egyezik meg. Az $[a, b]$ intervallum végpontjait toljuk ezután ki a végtelenbe, ahol előírhatjuk, hogy az áram ott tűnjön el, azaz ott $j(\infty) = j(-\infty) = 0$ legyen. Ekkor

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 0, \quad (9.11)$$

azaz ha kezdetben

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t=0)|^2 dx = 1 \quad (9.12)$$

a függvény normált volt, akkor a Schrödinger-egyenletből következően ilyen is marad.

10. Várható érték, szórás

A kvantummechanikában egy A fizikai mennyiség mérésekor kapott eredmény a véletlentől függ, azaz matematikai értelemben a mérési eredmény egy valószínűségi változó. Még ha a berendezésbe bemenő állapot mindig ugyanolyan ψ is, amit itt föltételezünk, a kimenő állapot, illetve a neki megfelelő mért érték általában többféle lehet, és ezekre nézve valószínűségeket mondhatunk csak. Tegyük föl először, hogy az A mennyiség mért értékei diszkrét, mint a Stern-Gerlach típusú kísérletben és jelöljük a mérési eredményeket α_k -val. Jelöljük továbbá N_k -val azt a számot, ahányszor a mérési eredmény α_k -nak adódott.

Ekkor a mért mennyiségek számtani közepét $\langle A \rangle$ -val jelölve:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_k N_k \alpha_k, \quad (10.1)$$

ahol $N = \sum_k N_k$ az összes mérések száma. Az $\frac{N_k}{N}$ számot, amelyre érvényes, hogy $0 \leq \frac{N_k}{N} \leq 1$, az α_k mérése relatív gyakoriságának nevezzük. A (10.1) képlet a kísérletek nyomán kapható középérték, most ezt a formulát extrapolálva $N \rightarrow \infty$ esetére, egy elméleti eredményt írunk le.

Ha az N szám egyre nagyobb, illetve gondolatban a végtelenbe tart, akkor az $\frac{N_k}{N}$ hányados tart az α_k mérésének valószínűségéhez

$$\frac{N_k}{N} \rightarrow \mathcal{P}(\alpha_k). \quad (10.2)$$

A fenti (10.1) összegből így kapott határértéket az A fizikai mennyiség várható értékének nevezzük, és $\langle A \rangle$ -val jelöljük:

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_k \mathcal{P}(\alpha_k) \alpha_k. \quad (10.3)$$

A valószínűségi számításban ezt a mennyiséget a mérési eredmény – mint valószínűségi változó – várható értékének nevezik. Mint korábban láttuk a $\mathcal{P}(\alpha_k)$ mérési valószínűségekre érvényes a $\mathcal{P}(\alpha_k) = |\langle u_k | \psi \rangle|^2 = |c_k|^2$ összefüggés, és tudjuk, hogy $\sum_k |c_k|^2 = 1$. Ezek szerint ilyenkor az $\langle A \rangle_\psi$ várható érték a következő ekvivalens alakokba írható:

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_k |\langle u_k | \psi \rangle|^2 \alpha_k = \sum_k \langle \psi | u_k \rangle \alpha_k \langle u_k | \psi \rangle = \quad (10.4)$$

$$= \sum_k \alpha_k |c_k|^2 = \sum_k c_k^* \alpha_k c_k. \quad (10.5)$$

Az A fizikai mennyiség mérésekor gyakran szükség van annak valamely $f(A)$ függvényére is, pl. a négyzetére: A^2 , vagy az exponenciálisára: $\exp(A)$. Ezek mért értékeit úgy kapjuk, hogy az A mérésekor kapott α_k eredmények megfelelő $f(\alpha_k)$ függvényét képezzük. Ennek megfelelően bevezethetjük az $f(A)$ várható értékét is az

$$\langle f(A) \rangle_\psi = \sum_k f(\alpha_k) |c_k|^2 \quad (10.6)$$

definícióval.

A mérési eredmények kiértékelésénél és a valószínűségi számításban egy további fontos mennyiség annak a mértéke, hogy az egyes mért eredmények mennyire térnek el azok átlagától, azaz a várható értéktől. Képezzük ehhez a mért értékek és az átlag $\alpha_k - \langle A \rangle_\psi$ különbségének a *négyzetét*, és átlagoljuk ezeket, majd tekintsük most is a kapott eredmény határértékét az $N \rightarrow \infty$ esetre. A kapott eredmény

$$\sum_k \frac{N_k}{N} (\alpha_k - \langle A \rangle_\psi)^2 \rightarrow \sum_k \mathcal{P}(\alpha_k) (\alpha_k - \langle A \rangle_\psi)^2. \quad (10.7)$$

Ez utóbbi mennyiséget az A mennyiség szórásnégyzetének nevezzük a ψ állapotban, és $(\Delta A)_\psi^2$ -vel jelöljük. $(\Delta A)_\psi^2$ -t a következő szokásos alakba is írhatjuk:

$$(\Delta A)_\psi^2 = \sum_k \mathcal{P}(\alpha_k)(\alpha_k - \langle A \rangle_\psi)^2 = \sum_k \mathcal{P}(\alpha_k)(\alpha_k^2 - 2\alpha_k \langle A \rangle_\psi + \langle A \rangle_\psi^2). \quad (10.8)$$

vagy kihasználva a várható érték (10.3) definícióját:

$$(\Delta A)_\psi^2 = \langle (A - \langle A \rangle_\psi)^2 \rangle_\psi = \langle A^2 \rangle_\psi - \langle A \rangle_\psi^2. \quad (10.9)$$

Szórásnak nevezzük $(\Delta A)_\psi^2$ négyzetgyökét, amelynek definíciója ezek szerint:

$$(\Delta A)_\psi = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle_\psi)^2 \rangle_\psi} = \sqrt{\langle A^2 \rangle_\psi - \langle A \rangle_\psi^2}. \quad (10.10)$$

Egyszerűen látható, hogy a szórásnégyzet, s emiatt a szórás is, tetszőleges ψ állapotban nemnegatív, valamint nulla akkor és csak akkor lehet, ha van egyetlen olyan α_n amelynek mérési valószínűsége a ψ állapotban 1, az összes többi α_k -é pedig nulla, azaz $\mathcal{P}(\alpha_k) = \delta_{nk}$. Éppen az ilyen ψ állapotokat neveztük korábban az A mennyiség sajátállapotainak, és ekkor nyilvánvalóan $\langle A \rangle_\psi = \alpha_n$. Az ilyenkor 1 valószínűséggel mért α_n érték pedig az A sajátértéke.

10.1 Feladat: Miért nem alkalmas az átlagtól való eltérések különbségének átlaga, azaz az $\langle A - \langle A \rangle_\psi \rangle_\psi$ mennyiség az átlagtól való eltérés mértékének kifejezésére?

Térjünk most át arra az esetre, amikor a mért értékek folytonosak, és tekintsük itt konkrétan egy részecske x koordinátájának mérését. Tekintsük az x tengely egy diszkrét x_k beosztását és jelöljük N_k -val azt a számot, ahányszor az N mérés közül az eredmény a $\Delta x_k = x_{k+1} - x_k$ intervallumba esik. Ekkor $N_k/N \approx \rho(\bar{x}_k)\Delta x_k$, ahol $\bar{x}_k$ egy a Δx_k intervallumba eső érték. A beosztás finomítása során így kapható $\rho(x)$ definiálja lényegében a koordináta – mint valószínűségi változó – valószínűségi sűrűségfüggvényét. A mérési eredmények számtani közepe $\sum_k \bar{x}_k(N_k/N) = \sum_k \bar{x}_k \rho(\bar{x}_k)\Delta x_k$, ami N növelése és a beosztás finomítása esetén az

$$\langle X \rangle := \int x \rho(x) dx \quad (10.11)$$

integrálhoz tart, ez a koordinátamérés várható értéke.

A kvantummechanikában azonban nem a $\rho(x)$, hanem az azt meghatározó hullámfüggvény az alapvető mennyiség. Valamely rögzített t_0 időpontban a $\Psi(x, t_0) = \psi(x)$ jelöléssel, $\rho(x) = |\psi(x)|^2$ alapján:

$$\langle X \rangle = \int \psi^*(x) x \psi(x) dx. \quad (10.12)$$

Ha az időfüggést is figyelembe vesszük, akkor a várható érték is időfüggő:

$$\langle X \rangle(t) = \int \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx. \quad (10.13)$$

Az előzőekben mondtak szerint a koordináta, mint X fizikai mennyiség valamely $f(X)$ függvényét az

$$\langle f(X) \rangle(t) = \int \Psi^*(x, t) f(x) \Psi(x, t) dx \quad (10.14)$$

formulával számíthatjuk ki. A koordináta szórásnégyzetét pedig a

$$(\Delta X)^2 = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 = \int \psi^*(x) x^2 \psi(x) dx - \left(\int \psi^*(x) x \psi(x) dx \right)^2 \quad (10.15)$$

képlet adja.

Megjegyezzük még a következőt. A jelölés itt is – mint korábban a diszkrét esetben – azt tükrözi, hogy X a részecske koordinátáját, mint fizikai mennyiséget jelöli. Míg x azt a változót jelöli, amilyen értékeket ez a koordináta egy-egy mérés során eredményez.

11. Az impulzus és a koordináta operátorának bevezetése

Amint az a koordinátára érvényes, az impulzusra is igaz lesz, hogy valamely kvantummechanikai állapotban mérve a részecske impulzusát általában sokféle különböző eredményt kaphatunk, tehát az eredményeknek csak valamilyen valószínűségi eloszlásáról lehet beszélni. Az előző szakaszokban a de Broglie-hullámok szuperpozíciójának kapcsán már utaltunk arra, hogy az ott szereplő $\tilde{\psi}(p)$ függvény annak az amplitúdója, hogy a részecske impulzusa éppen p . A megfelelő valószínűségegsűrűség $\varrho(p) = |\tilde{\psi}(p)|^2$, és így az x koordináta várható értékéhez teljesen hasonlóan az impulzus várható értékét definiálhatjuk a

$$\langle P \rangle = \int p \varrho(p) dp = \int \tilde{\psi}^*(p) p \tilde{\psi}(p) dp \quad (11.1)$$

átlaggal. Most megmutatjuk, hogy ezt a várható értéket akkor is ki tudjuk számítani, ha az x tengely menti megtalálás valószínűségi amplitúdóját ismerjük, anélkül, hogy előbb $\tilde{\psi}(p)$ -t meghatároznánk. Ehhez a következő átalakításokat hajtjuk végre:

$$\tilde{\psi}^*(p) p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi^*(x) p e^{ipx/\hbar} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) e^{ipx/\hbar} dx, \quad (11.2)$$

emiatt

$$\langle P \rangle = \int \tilde{\psi}^*(p) p \tilde{\psi}(p) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \int \left[\psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) e^{ipx/\hbar} \right] \tilde{\psi}(p) dp = \quad (11.3)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\int \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \tilde{\psi}(p) dp \right) dx = \quad (11.4)$$

$$= \int \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) dx, \quad (11.5)$$

tehát

$$\langle P \rangle = \int \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) dx. \quad (11.6)$$

Erről az eredményről azt mondjuk, hogy az $(x$ irányú) impulzust a $\psi(x)$ függvények terében a

$$\hat{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (11.7)$$

differenciáloperátor reprezentálja. A (11.6) kifejezés szerkezetében hasonlít a (10.12) és a (11.1) összefüggésekhez, azokban a függvény és a komplex konjugáltja között a függvény változója szerepel az integrandusban, amelyet úgy is fölfoghatunk, hogy az x illetve a p szorozza a mögötte álló függvényt, és ezek is operátoroknak tekinthetők. Ezt másképp úgy mondhatjuk, hogy ha az x tengely mentén mozgó részecske fizikai *állapotát* a $\Psi(x, t)$ függvény adja meg, akkor a koordinátát mint fizikai mennyiséget azzal az X operátorral adjuk meg, amely a $\Psi(x, t)$ -t x -el szorozza, az impulzusnak pedig a $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ operátor alkalmazása felel meg:

$$\hat{X}\Psi(x, t) = x\Psi(x, t), \quad (11.8)$$

$$\hat{P}\Psi(x, t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t). \quad (11.9)$$

A $\hat{P}$ operátor fönti alakjának helyes voltát más módon is megerősítjük. A klasszikus mechanikában érvényes $p = m \frac{dx}{dt}$ összefüggés alapján azt várjuk, hogy a kvantummechanikában az impulzus és a koordináta várható értéke között egy hasonló összefüggés áll fenn. Megmutatjuk, hogy ez valóban így van, azaz érvényes a kézenfekvő

$$\langle P \rangle = m \frac{d}{dt} \langle X \rangle \quad (11.10)$$

egyenlet. Itt

$$m \frac{d}{dt} \langle X \rangle = m \frac{d}{dt} \int \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx = m \int \left(\frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} x \Psi(x, t) + \Psi^*(x, t) x \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \right) dx, \quad (11.11)$$

mert az időfüggést itt a $\Psi(x, t)$ hordozza, $dx/dt = 0$ az integráljel alatt. Használjuk most a Schrödinger-egyenletet, és a komplex konjugáltját melyből

$$m \frac{d}{dt} \langle X \rangle = \frac{\hbar}{2i} \int \left(\frac{\partial^2 \Psi^*(x, t)}{\partial x^2} x \Psi(x, t) - \Psi^*(x, t) x \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \right) dx. \quad (11.12)$$

Az integrandust itt a

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \Psi - \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) - \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \Psi - \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial x} - |\Psi|^2 \right) + 2\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \end{aligned} \quad (11.13)$$

alakba írhatjuk, ahol az első tag integrálja a zárójelben lévő kifejezés. Erről föltehetjük, hogy a $\pm\infty$ ben lévő határokon eltűnik, azaz a $|\Psi|^2$ nullához tart, és $\frac{\partial \Psi}{\partial x} \Psi^*$ illetve ennek komplex konjugáltja $1/x$ -nél gyorsabban megy 0-hoz a végtelenben, ellenkező esetben $|\Psi|^2$ integrálja nem maradna véges a teljes x tengely mentén. Így az integrandusban az utolsó tag marad, azaz

$$m \frac{d}{dt} \langle X \rangle = \frac{\hbar}{i} \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx. \quad (11.14)$$

A jobb oldal viszont valóban megegyezik (11.6)-tal, azaz a (11.6) valóban teljesíti azt, amit vártunk tőle, tehát ilyen szempontból is jogosan tekinthető az impulzus várható értékének.

Az impulzus négyzetének várható értéke így a

$$\langle P^2 \rangle = \int \Psi^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \Psi(x, t) dx \quad (11.15)$$

integrállal számítható. A mozgási energia operátorának hatása a klasszikus $p^2/2m$ összefüggésnek megfelelően így

$$\hat{T} = \frac{\hat{P}^2}{2m} \Psi(x, t) = -\frac{1}{2m} \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t). \quad (11.16)$$

Vessük ez utóbbit össze az alapvetőnek tekintett (9.1) egyenlet első tagjával. Látható, hogy az ott szereplő első tag éppen a kinetikus energia operátorának hatása. Így a Schrödinger-egyenlet jobb oldalán a kinetikus és a potenciális energia, azaz a teljes energia operátorának összege hat a $\Psi(x, t)$ függvényre. Egyenletünket tehát úgy is írhatjuk, hogy

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = (\hat{T} + \hat{V}) \Psi(x, t), \quad (11.17)$$

ahol az előzőeknek megfelelően: $\hat{V} = V(\hat{X}) \Psi(x, t) = V(x) \Psi(x, t)$. A teljes energia operátorát a kvantummechanikában Hamilton-operátornak nevezzük és $\hat{H}$ -val jelöljük. Ha az állapotot a $\Psi(x, t)$ hullámfüggvény adja meg, akkor a $\hat{H}$ jelölést használjuk, és

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \quad (11.18)$$

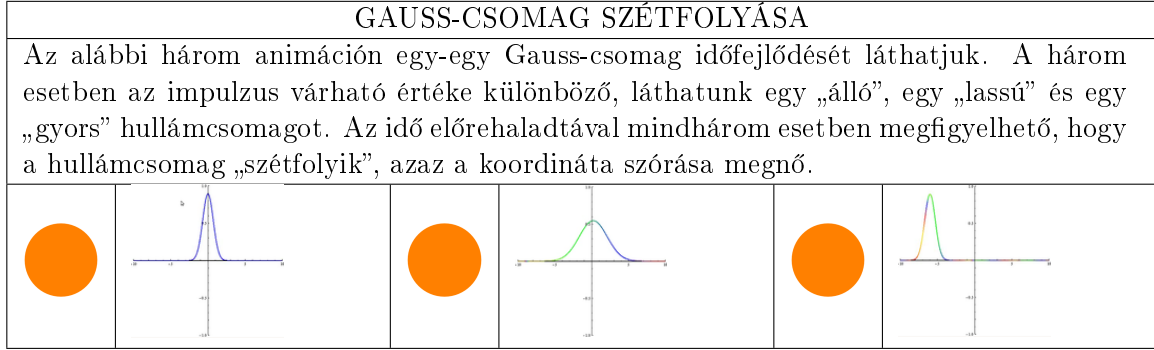
illetve a Schrödinger-egyenlet:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(x, t). \quad (11.19)$$

11.1 Feladat: Tekintsük a $\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + i\frac{p_0}{\hbar}x}$ Gauss-típusú hullámfüggvényt.

a) Mutassuk meg, hogy $\langle X \rangle = x_0$ és $\langle P \rangle = p_0$.

b) Számítsuk ki X és P szórását ebben az állapotban.



11.1. X és P nem fölcserélhető

Az a tény, hogy a kvantummechanikában a koordinátahoz és az impulzushoz operátorokat rendelünk, és azok a fönti alakúak, azzal a következménnyel jár, hogy ezek hatása egy $\Psi(x, t)$ állapotra nem lesz fölcserélhető.

$$\begin{aligned}\hat{X}\hat{P}\Psi(x, t) - \hat{P}\hat{X}\Psi(x, t) &= -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} [x\Psi(x, t)] = \\ &= i\hbar \Psi(x, t),\end{aligned}\quad (11.20)$$

vagy másképpen

$$(\hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X})\Psi(x, t) = i\hbar \Psi(x, t) \quad (11.21)$$

bármilyen függvényre. Ami éppen azt jelenti, hogy a két operátor hatása a kétféle sorrendben különböző, vagyis azok nem fölcserélhetőek.

Vezessük be az

$$\hat{X}\hat{P} - \hat{X}\hat{P} = [\hat{X}, \hat{P}] \quad (11.22)$$

jelöléssel az X , és P *kommutátorának* nevezett operátort. Ennek alapján a nem fölcserélhetőséget az jelenti, hogy

$$[X, P] = i\hbar, \quad (11.23)$$

ahol az $i\hbar$ mellé az egységoperátort is oda szoktuk érteni. Ezt a relációt az X és P fölcserélési relációjának nevezzük.

11.2. Háromdimenziós mozgás

Most röviden összefoglaljuk, hogyan módosulnak a fönti összefüggések, ha a vizsgált részecske három dimenzióban mozog. A hullámfüggvény ebben az esetben a helyvektortól és az időtől függ. $\Psi(\mathbf{r}, t)$ annak a valószínűségi amplitúdója, hogy a részecske a t időpontban az $\mathbf{r}$ helyen található. A normálási föltétel:

$$\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r} = 1. \quad (11.24)$$

A helykoordináta operátort az

$$\hat{\mathbf{R}}\Psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{r}\Psi(\mathbf{r}, t), \quad (11.25)$$

az impulzusét a

$$\hat{\mathbf{P}}\Psi(\mathbf{r}, t) = -i\hbar \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (11.26)$$

összefüggés definiálja.

Az állapot időfüggését az

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (11.27)$$

Schrödinger-egyenlet adja meg.

Az állapotot a $\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)$ impulzusamplitúdóval is jellemezhetjük, amelyet a $\Psi(\mathbf{r}, t)$ -vel a

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int \Psi(\mathbf{r}, t) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} d^3\mathbf{r}, \quad (11.28)$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} d^3\mathbf{p} \quad (11.29)$$

Fourier-transzformációs képletek kapcsolnak össze.

A háromdimenziós esetben a koordináta és az impulzus fölcserélési relációjának alakja:

$$[X_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij}. \quad (11.30)$$

12. Az energiasajátérték-egyenlet

Tekintsük most ismét (az egyszerűség kedvéért egydimenziós mozgás esetén) a kvantummechanika dinamikai egyenletét, az időfüggő Schrödinger-egyenletet:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t). \quad (12.1)$$

Mivel itt föltételezésünk szerint a potenciális energia nem függ az időtől, kereshetjük ennek bizonyos megoldásait szorzat alakban

$$\Psi(x, t) = \tau(t) u(x). \quad (12.2)$$

Ezt az eljárást nevezzük szeparációnak, mert a kétváltozós függvényt szétválasztjuk két egyváltozós függvény szorzatára. Az (12.1) egyenlet nem minden megoldása ilyen, de célszerű először ezeket a megoldásokat megkeresni. Visszaírva a fönti szorzatot a (12.1) egyenletbe, kapjuk, hogy

$$i\hbar u(x) \frac{\partial \tau(t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} + V(x) u(x) \right) \tau(t). \quad (12.3)$$

Ha ezt elosztjuk $\tau(t) u(x)$ -el, akkor az alábbi egyenlethez jutunk:

$$i\hbar \frac{1}{\tau(t)} \frac{\partial \tau(t)}{\partial t} = \frac{1}{u(x)} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} + V(x) u(x) \right). \quad (12.4)$$

Minthogy a két oldal két különböző változótól – x -től illetve t -től – függ, és ezek minden értékére megegyezik, ez csak úgy lehetséges, ha mindkét oldal egy x -től és t -től független állandó, amely láthatólag energia dimenziójú, jelöljük ezt ε -nal. Így két egyenletet nyerünk, melyek közül az egyik

$$i\hbar \frac{\partial \tau(t)}{\partial t} = \tau(t) \varepsilon. \quad (12.5)$$

Ennek megoldása

$$\tau(t) = C e^{-i\varepsilon t/\hbar}, \quad (12.6)$$

ahol C egy állandó.

A másik egyenlet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} + V(x) u(x) = \varepsilon u(x). \quad (12.7)$$

Az egyenlet bal oldalán éppen az az u függvényre ható operátor áll, amelyet az előző szakaszban az energia operátorának tekintettünk. Ez volt a Hamilton-operátornak nevezett lineáris differenciál-operátor, amely a koordinátától függő hullámfüggvények esetén reprezentálta az energiát. A (12.7) egyenlet ennek alapján így írható:

$$Hu(x) = \varepsilon u(x). \quad (12.8)$$

Ez egy úgynevezett sajátérték-egyenlet: az operátor hatása az $u(x)$ függvényre olyan, hogy azt önmaga egy számszorosába viszi át. Mivel az operátor itt az energia, az egyenlet neve energiasajátérték-egyenlet. Szokás ezt néha időfüggetlen Schrödinger-egyenletnek is nevezni. Nem mindig hangsúlyozzák, de lényeges, hogy az (12.7) egyenletet mindig ki kell egészíteni bizonyos peremföltételekkel, amelyek az $u(x)$ -ekre vonatkoznak az értelmezési tartományuk peremén. Másképpen ez azt jelenti, hogy a H operátor értelmezéséhez ezek a peremföltételek is hozzá tartoznak. A peremföltételeket valamilyen fizikailag kézenfekvő érveléssel szoktuk kiválasztani. A (12.7) egyenlet megoldásai közül tehát ki kell választani azokat a speciális eseteket, amelyeknél az $u(x)$ -ek a peremföltételeket teljesítik, ami általában csak bizonyos speciális ε értékek esetén lehetséges. Az egyenletet kielégítő $u_\varepsilon(x)$ -ek a H -nak a megfelelő ε energiasajátértékekhez tartozó sajátfüggvényei. A későbbiekben jónéhány példát fogunk látni erre.

A szeparációs feltétel szerint a (12.1) egyenletnek megoldása lesz minden

$$\psi_\varepsilon(x, t) = u_\varepsilon(x)e^{-i\varepsilon t/\hbar} \quad (12.9)$$

alakú függvény. A lehetséges ε energiasajátértékek lehetnek diszkrétnek ε_n ($n = 1, 2, \dots$) és folytonosak is, azaz lehetséges, hogy bizonyos intervallumon belül minden ε -hoz tartozik megoldás. A kapott ε -ok összességét a H operátor *spektrumának*, vagy energiaspektrumnak szokás nevezni.

Általában végtelen sok ilyen (12.9) alakú speciális megoldás létezik, de ezzel nem merítettük ki az összes megoldást. Mivel a Hamilton-operátor, s így a Schrödinger-egyenlet is lineáris, ezért a fenti függvények lineáris kombinációi is megoldások, amelyek általános alakja

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n u_n(x) e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} + \int c(\varepsilon) u_\varepsilon(x) e^{-i\varepsilon t/\hbar} d\varepsilon. \quad (12.10)$$

Itt a c_n -ek tetszőleges számok és a $c(\varepsilon)$ tetszőleges függvénye ε -nak, azzal a megkötéssel, hogy $\Psi(x, t)$ -nek normálhatónak kell lennie, azaz olyannak, hogy az $\int |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$ teljesüljön.

Meg lehet mutatni, – bár ez általában nem egyszerű – hogy a fizikailag értelmes $V(x)$ potenciálok illetve a nekik megfelelő H esetén a (12.1) egyenlet minden megoldása megadható a (12.10) alakban.

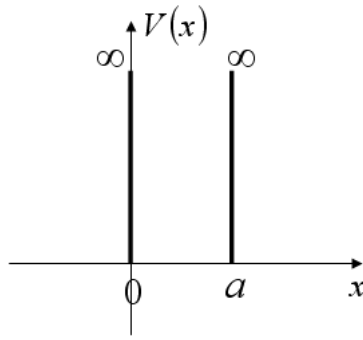
A (12.9) alakú $\psi_\varepsilon(x, t)$ megoldások láthatóan speciálisak abban az értelemben, hogy a hozzájuk tartozó valószínűségi sűrűség $|\psi_\varepsilon(x, t)|^2 = |u_\varepsilon(x)|^2$ nem függ az időtől, noha maga a függvény, azaz a valószínűségi amplitúdó időfüggő. Emiatt ezeket a hullámfüggvényeket, illetve a nekik megfelelő fizikai állapotokat *stacionárius állapotoknak* nevezzük.

12.1 Feladat: Mutassuk meg, hogy két különböző ε -hoz tartozó $\psi_\varepsilon(x, t)$ stacionárius hullámfüggvény lineáris kombinációjához tartozó valószínűségi sűrűségfüggvény függ az időtől. Milyen ennek az időfüggésnek a jellege?

13. Végtelen potenciálgödörbe zárt részecske

Az előző szakaszban ismertetett eljárást most alkalmazzuk arra az egyszerű – ámde tanulságos és fontos – példára, amikor a részecske egy végtelen magas potenciálgödörbe van zárva, de azon belül szabadon mozog. Ekkor

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } 0 < x < a \\ \infty & \text{ha } x \leq 0 \text{ vagy } x \geq a. \end{cases} \quad (13.1)$$



38. ábra. a szélességű végtelen magas potenciálgödör

Ez egy egyszerű modellje pl. egy a hosszúságú láncmolekula mentén többé-kevésbé szabadon mozgó elektron viselkedésének. Szokás ezt egydimenziós dobozba zárt részecske modellnek is nevezni.

13.1. Az energiasajátfüggvények és sajátértékek meghatározása

Meg kell oldanunk ezzel a $V(x)$ -el a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) = \varepsilon u(x) \quad (13.2)$$

sajátérték-egyenletet. Mivel a potenciál az $0 < x < a$ intervallumon kívül végtelen, ott $u(x) = 0$. Ez felel meg annak, hogy ott nulla valószínűséggel találjuk a részecskét. Előírjuk, hogy az $u(x)$ hullámfüggvény legyen folytonos az $x = a$ és $x = 0$ pontokban, azaz legyen $u(0) = u(a) = 0$. (Itt megjegyezzük, hogy néha szokás másfajta peremföltételeket is szabni). Az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet tehát a $0 < x < a$ tartományon fogjuk megoldani, amelyen belül $V(x) = 0$. A megoldandó egyenlet így

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon u(x) = 0. \quad (13.3)$$

Vizsgáljuk az egyenlet megoldásait ε előjele szerint. Ha itt $\varepsilon < 0$, akkor az egyenlet alakja

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - \kappa^2 u = 0, \quad (13.4)$$

ahol $\kappa^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon > 0$. Ennek általános megoldása az $e^{\kappa x}$ és az $e^{-\kappa x}$ függvények tetszőleges lineáris kombinációja. Egyszerűen látható, hogy ezeknek a függvényeknek nincs olyan lineáris kombinációja, amely *egyszerre* teljesítené mindkét ($u(0) = u(a) = 0$) peremföltételt, kivéve az $u(x) \equiv 0$ esetet. Az utóbbi azonban nem jöhet szóba, mert a négyzete nem valószínűségi sűrűségfüggvény. Ez azt jelenti, hogy az $\varepsilon < 0$ energiához nem tartozik fizikailag megengedhető megoldás, összhangban azzal a klasszikus képpel is, hogy egy részecske energiája nem lehet kisebb a potenciális energia minimumánál.

13.1 Feladat: Bizonyítsuk, hogy az $u(0) = u(a) = 0$ határföltétel esetén, az $\varepsilon = 0$ sajátérték sem jöhet szóba.

Vizsgáljuk ezután az $\varepsilon > 0$ energia esetét. Bevezetve most a

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon > 0 \quad (13.5)$$

jelölést a

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + k^2 u(x) = 0 \quad (13.6)$$

egyenletet kapjuk, melynek általános megoldása

$$u(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx), \quad (13.7)$$

valamilyen A és B (egyelőre ismeretlen) konstans paraméterekkel. Az előírt $u(0) = 0$ peremföltétel miatt, a 0 helyen a szinuszos tag A értékétől függetlenül 0, így fönn kell állania a $B \cos(0) = 0$, egyenletnek, amiből $B = 0$. Így a keresett függvény alakja a $[0, a]$ intervallumon belül szükségképpen $u(x) = A \sin(kx)$. A másik, $u(a) = 0$ egyenletből így $A \sin(ka) = 0$. Ebben az egyenletben A nem lehet nulla, mert az mindenhol azonosan nulla hullámfüggvényt eredményezne, amit kizártunk, így csak $\sin ka = 0$ lehet. Ez akkor teljesül, ha $ka = n\pi$, ahol n tetszőleges egész, másképpen, ha $k = n\pi/a =: k_n$. Az $n = 0$ esetet azonban kizárjuk, mert az a $k = 0$ -nak, vagyis az $u(x) = A \sin(kx)$ miatt, az azonosan nulla megoldásnak felelne meg (ez azonos a korábban kizárt $\varepsilon = 0$ esettel). Észrevesszük továbbá, hogy egy tetszőleges pozitív n esetén kapott $u(x) = \sin n\pi x/a$ megoldás és az n helyett $-n$ -nel fölírta $u(x) = \sin(-n\pi x/a) = -\sin(n\pi x/a)$ megoldás csak egy -1 es szorzóban különbözik egymástól, tehát ezek nem lineárisan függetlenek, a hozzátartozó valószínűségi sűrűségek azonosak. Ezért egy negatív egész n -hez tartozó megoldás fizikailag sem különbözik a megfelelő pozitív n -hez tartozó megoldástól, vagyis elegendő csak a pozitív n -ekre szorítkozni. Így is végtelen sok lineárisan független megoldás van, melyek alakja

$$u_n(x) = A \sin(k_n x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (13.8)$$

Ez a hullámfüggvény még nem normált, a normáláshoz számítsuk ki $\langle u_n | u_n \rangle$ -et:

$$\begin{aligned} \langle u_n | u_n \rangle &= \int_0^a |u_n|^2 dx = A^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \\ &= A^2 \int_0^a \frac{1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{2} dx = A^2 \left\{ \frac{1}{2} [x]_0^a - \frac{1}{2} \left[\frac{\sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{\frac{2n\pi}{a}} \right]_0^a \right\} \\ &= A^2 \frac{a}{2}. \end{aligned} \quad (13.9)$$

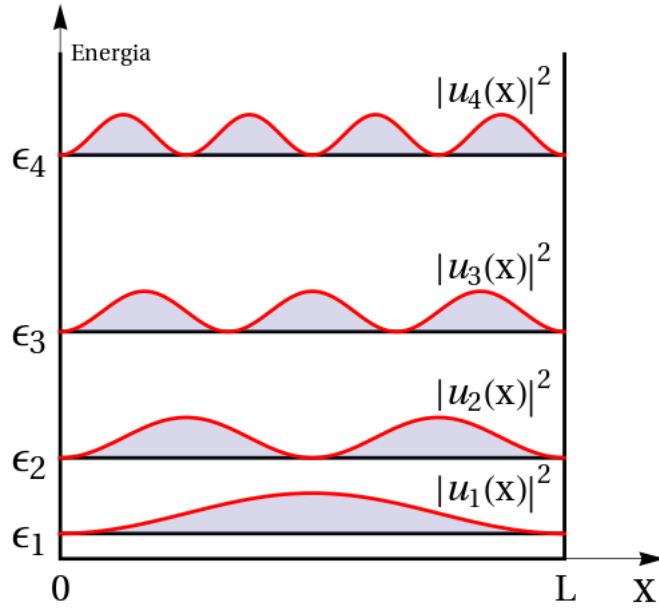
Mivel a normáltsághoz az $\langle u_n | u_n \rangle = 1$ feltétel teljesülése szükséges, kapjuk, hogy $A = \sqrt{2/a}$. Visszahelyettesítve ezt az u_n -re vonatkozó (13.8) kifejezésbe:

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad \text{ahol } n = 1, 2, 3, \dots \quad (13.10)$$

Az $u_n(x)$ függvények abszolútérték négyzetét a 39. ábra mutatja.

Az $u_n(x)$ sajátfüggvényekhez tartozó energiasajátértékek a (13.5) összefüggés szerint a következők lehetnek (minden n -re más-más)

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, \quad \text{ahol } n = 1, 2, 3, \dots \quad (13.11)$$



39. ábra. A végtelen potenciálgödör sajátfüggvényeinek abszolútérték-négyzete

Vagyis a kvantummechanika szerint a végtelen magas falú potenciálgödörben lévő részecske energiasajátértékei diszkrét, itt nincs folytonos spektrum, a megfelelő sajátfüggvények pedig állóhullámok, melyeknek a gödör falainál csomópontjai vannak. Ezek úgynevezett kötött állapotok, mert a sajátfüggvények teljes egészében egy véges tartományon lokalizáltak, azon kívül eltűnnek. A sajátfüggvényt, illetve a sajátértéket meghatározó n számot *kvantumszámnak* szokás nevezni.

A klasszikus esetben a legalacsonyabb energiájú állapotban a részecske a potenciálgödörön belül nyugalomban van, azaz mind a mozgási, mind a potenciális energiája nulla. Ezzel szemben a kvantumos esetben a legkisebb energia $\epsilon_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$. Ezt alapállapot energiájának szoktuk nevezni.

Fontos tulajdonsága az $u_n(x)$ sajátfüggvényeknek a következő:

$$\int_0^a u_n^*(x) u_l(x) dx = \delta_{nl}, \quad (13.12)$$

$n = l$ esetben éppen a normálási feltétel áll előttünk. Míg $n \neq l$ esetén az integrál:

$$\begin{aligned} \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{l\pi x}{a}\right) dx &= \frac{2}{a} \int_0^a \left[\cos \frac{(n-l)\pi x}{a} - \cos \frac{(l+n)\pi x}{a} \right] dx = \\ &= \frac{\sin(n-l)\pi}{(n-l)\pi} - \frac{\sin(l+n)\pi}{(l+n)\pi} = 0. \end{aligned} \quad (13.13)$$

Tehát a különböző sajátértékekhez tartozó sajátfüggvények ortogonálisak. Mivel $n = l$ esetben az eredmény éppen a normálási feltétel, az $u_n(x)$ függvényrendszert ortonormált rendszernek nevezzük. Itt megjegyezzük, hogy mivel itt a függvények valósak, az első tényező komplex konjugálása nem szükséges. A későbbiekben azonban találkozunk majd olyan példákkal, ahol a sajátfüggvények komplexek, ezért írtunk itt az általánosabb esettel való konzisztencia miatt $u_n^*(x)$ -ot az integrandus első tényezőjében.

13.2 Feladat: Számítsuk ki az impulzus várható értékét az $u_n(x)$ stacionárius állapotokban.

13.3 Feladat: Számítsuk ki a P^2 várható értékét az $u_n(x)$ állapotban a (11.15) képlettel. Mivel most $P^2 = 2mH$ a várható értéket jóval egyszerűbben is kiszámíthatjuk. Hogyan?

13.2. Kifejtés a sajátfüggvények szerint

Egy fontos matematikai tétel, hogy tetszőleges olyan $\psi(x)$ függvény, amely teljesíti a $\psi(0) = \psi(a) = 0$ peremföltételt, kifejthető a fönti $\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$ ún. szinusz rendszer szerint, vagyis létezik olyan c_n általában végtelen számsorozat, hogy

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right). \quad (13.14)$$

Ez nagyon hasonlít a periodikus függvényekre vonatkozó Fourier-sor esetére. A c_n együtthatók kiszámításához tekintsük a fönt látott ortogonalitási, illetve normáltsági relációt, azaz szorozzuk a (13.14) egyenletet $\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{l\pi x}{a}\right)$ -val és integráljunk 0-tól a -ig. Kapjuk, hogy

$$c_l = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{l\pi x}{a}\right) \psi(x) dx. \quad (13.15)$$

A lényegében hasonló – a periodikus függvényekre először J. Fourier által alkalmazott – módszer nyomán ezt a Fourier-trükk néven is szokás emlegetni.

A korábbiak szerint az időfüggő Schrödinger-egyenlet általános megoldása ezek szerint jelen esetben

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n u_n(x) e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_n c_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) e^{-i\frac{\hbar\pi^2}{2ma^2} n^2 t}. \quad (13.16)$$

A hullámfüggvény a $t = 0$ időpontban

$$\Psi(x, 0) =: \psi_0(x) = \sum_n c_n u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_n c_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right). \quad (13.17)$$

Ennek értéke megadható az összes, általában komplex c_n számmal, vagy megadhatjuk magát a $\psi_0(x)$ függvényt is, amiből a Fourier-trükkel a c_n együtthatók meghatározhatók, azaz a $\psi_0(x)$ függvényhez, mint kezdeti föltételhez tartozó megoldása a Schrödinger-egyenletnek a

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_n \left(\int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi y}{a}\right) \psi_0(y) dy \right) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) e^{-i\frac{\hbar\pi^2}{2ma^2} n^2 t}, \quad (13.18)$$

ahol a (13.15) egyenletből ide másolt integrálban az integrációs változót a zavar elkerülése érdekében átjelöltük y -ra. Ez a képlet, amelyet később jóval általánosabb módon is tárgyalni fogunk, mutatja, hogy hogyan lehet fölírni adott kezdeti föltételhez tartozó időfüggő megoldást.

13.3. A sajátfüggvények paritása

A (13.10) képlettel megadott energiasajátfüggvények egy sajátossága a következő: az intervallum középpontjára, az $x = a/2$ pontra tükrözve a függvényeket, azok páratlan n esetén nem változnak, páros n esetén a (-1) -szeresükre változnak. Ez még egyszerűbben látszik, ha az intervallumot ahol a részecske mozoghat eltoljuk úgy, hogy a tükrözési pont az $x = 0$ helyen legyen. Ekkor a doboz határai az $x = -a/2$ és $x = a/2$ helyeken lesznek, a megfelelő megoldásokat úgy kapjuk, hogy a függvények argumentumában az

$$x \rightarrow x + a/2 \quad (13.19)$$

helyettesítést végezzük. Ekkor

$$\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \rightarrow \sin\left(\frac{n\pi x}{a} + \frac{n\pi}{2}\right) = \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) + \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right). \quad (13.20)$$

Ezek a függvények így páratlan n esetén $(-1)^{(n-1)/2} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$ -et adnak, míg páros n esetén az eredmény $(-1)^{n/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$. A függvények előtt szereplő ± 1 együtthatót választhatjuk az eredeti

helyett mindig 1-nek, ez az eredeti függvény helyettesítése egy vele (triviális módon) lineárisan összefüggő függvénnyel, s így a normálással együtt a következő függvényrendszert kapjuk

$$v_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) & n = 1, 3, 5 \dots \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) & n = 2, 4, 6 \dots \end{cases} \quad (13.21)$$

amellyel ismét kifejtethető tetszőleges, a $\psi(\pm a/2) = 0$ határföltételt teljesítő $\psi(x)$ függvény:

$$\psi(x) = \sum_n c_n v_n(x), \quad (13.22)$$

ahol a kifejtési együtthatókat a

$$c_n = \int_{-a/2}^{a/2} v_n(x) \psi(x) dx \quad (13.23)$$

integrál adja.

13.4 Feladat: Mutassuk meg, hogy az így formálisan transzformált függvényrendszer is páronként ortogonális függvényekből áll, és ebből a fönti (13.23) tétel következik.

Jól ismert, hogy azokat a $\psi(x)$ függvényeket, amelyekre $\psi(-x) = \psi(x)$ páros függvényeknek, míg azokat amelyekre $\psi(-x) = -\psi(x)$ páratlan függvényeknek nevezzük. Geometriailag ez azt jelenti, hogy páros függvényt az origóra tükrözve az nem változik, míg a páratlan előjelet vált. Tekintettel arra, hogy a $\cos(kx)$ függvény páros, míg a $\sin(kx)$ páratlan (tetszőleges k esetén) a fönti transzformáció után nyilvánvalóvá vált az a tulajdonság, hogy az intervallumba zárt részecske esetén páratlan n -re a sajátfüggvények páros függvények, míg páros n -re páratlanok az intervallum közepére vonatkozó tükrözésre nézve, amit jelen esetben már az $x = 0$ pontra vonatkozó $x \rightarrow -x$ transzformáció jelent.

Nem meglepő módon itt is érvényes, hogy tetszőleges $[-a/2, a/2]$ intervallumon tekintett olyan függvényre, amely a határpontokban eltűnik, érvényes, hogy az kifejtethető a $v_n(x)$ függvények szerint.

A kvantumfizikában szokásos elnevezés szerint egy függvény páros vagy páratlan volta esetén azt mondjuk, hogy a függvény határozott *paritással* (párossággal) rendelkezik. Nyilvánvaló, hogy egy függvény általában sem nem páros, sem nem páratlan, tehát nincs határozott paritása. A paritás fogalmát a következőképpen formalizáljuk. Bevezetjük a *paritás-operátort* az x tengelyen értelmezett $\psi(x)$ függvényeken a

$$\Pi\psi(x) = \psi(-x) \quad (13.24)$$

definícióval. (Később ki fogjuk terjeszteni a paritás fogalmát három dimenziós esetre is.) Speciálisan egy $\psi^+(x)$ páros függvényre a

$$\Pi\psi^+(x) = \psi^+(x), \quad (13.25)$$

míg egy $\psi^-(x)$ páratlan függvényre a

$$\Pi\psi^-(x) = -\psi^-(x) \quad (13.26)$$

transzformációs formula érvényes. Ezt a két összefüggést egy-egy sajátérték-egyenletnek tekinthetjük, mely szerint a páros függvények a paritás operátor $+1$ sajátértékéhez, míg a páratlanok a Π operátor -1 sajátértékéhez tartozó sajátfüggvények. Az intervallumba zárt részecske esetén a $\cos(n\pi x/a)$ és $\sin(n\pi x/a)$ sajátfüggvények tehát nem csak a H Hamilton-operátor sajátfüggvényei, hanem *ugyanakkor* a Π paritás-operátoré is.

Egyszerűen látható, hogy a paritás-operátornak nincs más sajátértéke, csak a ± 1 . Tegyük föl ugyanis, hogy

$$\Pi\psi(x) = \lambda\psi(x). \quad (13.27)$$

Alkalmazzunk egy újabb tükrözést, ekkor egyrészt

$$\Pi^2\psi(x) = \Pi\lambda\psi(x) = \lambda^2\psi(x), \quad (13.28)$$

másrészt a két egymást követő tükrözés nyomán vissza kell kapnunk az eredeti függvényt. Így $\Pi^2\psi(x) = \psi(x)$, amiből $\lambda^2 = 1$, azaz $\lambda = \pm 1$.

Tekintsünk most ismét egy $\psi(x)$ tetszőleges függvényt, nem feltétlenül egy a dobozba zárt részecskéhez tartozó állapotot. Ez mindig fölírható mint egy páros és egy páratlan függvény összege, hiszen

$$\psi(x) = \frac{1}{2}[\psi(x) + \psi(-x)] + \frac{1}{2}[\psi(x) - \psi(-x)]. \quad (13.29)$$

Itt az első tag nyilvánvalóan páros, azaz a Π operátor $+1$ sajátértékéhez tartozó sajátfüggvény, míg a második tag páratlan, azaz a Π operátor -1 sajátértékéhez tartozik. A fönti egyenlőséget ezért úgy is tekinthetjük, hogy a $\psi(x)$ -et kifejtettük a Π operátor sajátfüggvényei szerint, csakúgy mint ahogyan a (13.14) képletben a H sajátfüggvényei szerinti kifejtés történt. Vegyük még észre, hogy a páros és páratlan rész szorzatának integrálja bármely, az origóra szimmetrikus intervallumra nézve szükségképpen eltűnik:

$$\int_{-L}^L \psi^+(x)\psi^-(x)dx = 0, \quad (13.30)$$

ahol L tetszőleges, lehet $a/2$ is. Más szóval a Π operátorra is igaz, hogy a különböző sajátértékekhez tartozó sajátfüggvényei ortogonálisak.

A paritás igazi jelentőségének megvilágítására, most megvizsgáljuk mi történik egy páros vagy egy páratlan függvénnyel az időfejlődés során. Itt a dobozba zárt részecskére szorítkozunk, de a tanulság ennél általánosabban is igaz lesz. Legyen $\psi(x)$ páros, azaz ekkor

$$\psi(x) = \sum_{n=2k+1} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad (13.31)$$

mert a kifejtés nem tartalmazhatja a páratlan $\sin$ függvényeket, így az összeg (13.21)-nek megfelelően páratlan n -ekre vonatkozik. Ennek a függvénynek az időfejlődése a korábbiak szerint

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=2k+1} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}, \quad (13.32)$$

ahol $\varepsilon_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$ (páratlan n -ekkel). A lényeges észrevétel, hogy a függvény minden t időpillanatban továbbra is páros marad. Hasonló állítás igaz nyilvánvalóan egy olyan függvényre is amely kezdetben páratlan volt, tehát az a későbbiekben is páratlan marad. Ez azt jelenti, hogy a paritás egy *megmaradó* tulajdonság, s ha azt a Π operátor sajátértékével jellemezzük az az idő folyamán nem változik. Ezért azt mondjuk, hogy Π paritás sajátértéke egy "jó kvantumszám". Vizsgáljuk meg alaposabban, hogy min múlik ez a tulajdonság!

Legyen a kezdeti állapot hullámfüggvénye mondjuk páros: $\Psi(x, 0) = \Psi(-x, 0) = \psi^+(x)$. Tekintsük az

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = H\Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t) \quad (13.33)$$

Schrödinger-egyenletet, és hajtsuk végre a Π műveletet az egyenlet mindkét oldalán

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Pi\Psi(x, t)) = \Pi H\Psi(x, t). \quad (13.34)$$

Abban a speciális esetben, ha H nem változik a tükrözéskor

$$\Pi H\Psi(x, t) = H\Pi\Psi(x, t) \quad (13.35)$$

kapjuk, hogy

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Pi \Psi(x, t)) = H (\Pi \Psi(x, t)). \quad (13.36)$$

Ehhez elegendő, hogy $V(x)$ páros függvény legyen, mert a $\partial^2/\partial x^2$ nem változik az $x \rightarrow -x$ transzformáció esetén. Ekkor viszont a Schrödinger-egyenlet linearitása miatt, a

$$\Psi^+(x, t) = \frac{1}{2}(1 + \Pi)\Psi(x, t) \quad (13.37)$$

és a

$$\Psi^-(x, t) = \frac{1}{2}(1 - \Pi)\Psi(x, t) \quad (13.38)$$

függvények is külön-külön kielégítik az egyenletet. Ez éppen azt jelenti, hogy a paritás amennyiben kezdetben jellemezte a hullámfüggvényt, az időfejlődés után is megmarad. Ennek föltétele a (13.35) szerint tehát az volt, hogy

$$(\Pi H - H \Pi)\Psi(x, t) = 0, \quad (13.39)$$

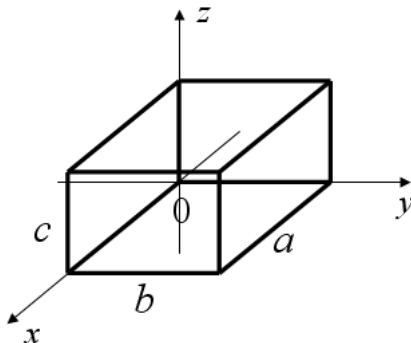
azaz a $\Pi H - H \Pi =: [\Pi, H]$ kommutátor tűnjön el:

$$[\Pi, H] = 0. \quad (13.40)$$

ami éppen a H tükrözési szimmetriáját fejezi ki a kvantummechanikában.

14. Részecske háromdimenziós dobozban

Tegyük fel, hogy a részecske számára megengedett tartomány az alábbi a, b, c oldalú téglatest.



40. ábra.

Ez a következő potenciálnak felel meg

$$V(x, y, z) = V(x) + V(y) + V(z), \quad (14.1)$$

ahol az egyes egydimenziós potenciálok ugyanolyanok, mint az előző feladatban, azaz

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } 0 < x < a \\ \infty & \text{egyébként,} \end{cases}$$

$$V(y) = \begin{cases} 0 & \text{ha } 0 < y < b \\ \infty & \text{egyébként,} \end{cases}$$

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{ha } 0 < z < c \\ \infty & \text{egyébként.} \end{cases}$$

A részecske most is csak kötött állapotokkal rendelkezhet a dobozon belül, melyeket ismét az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldásaiként kapunk:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{d^2 u}{dy^2} + \frac{d^2 u}{dz^2} \right) = \varepsilon u, \quad (14.2)$$

ahol $u = u(x, y, z)$.

Keressük a megoldást $u(x, y, z) = u_1(x) u_2(y) u_3(z)$ szorzat alakban. Az egydimenziós feladatban mondottakhoz hasonló okokból, ebben az esetben is csak az $\varepsilon > 0$ esetben kapunk fizikailag értelmezhető megoldást. Ekkor a Schrödinger-egyenlet (a $k = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} > 0$ jelöléssel):

$$\frac{d^2 u_1(x)}{dx^2} u_2(y) u_3(z) + \frac{d^2 u_2(y)}{dy^2} u_1(x) u_3(z) + \frac{d^2 u_3(z)}{dz^2} u_1(x) u_2(y) = -k^2 u_1(x) u_2(y) u_3(z). \quad (14.3)$$

Osszuk el ezt az egyenletet $u_1(x) u_2(y) u_3(z)$ -vel, ekkor kapjuk:

$$\frac{1}{u_1} \frac{d^2 u_1}{dx^2} + \frac{1}{u_2} \frac{d^2 u_2}{dy^2} + \frac{1}{u_3} \frac{d^2 u_3}{dz^2} = -k^2. \quad (14.4)$$

A három különböző változótól függő tag összege csak úgy lehet minden x, y, z esetén állandó, ha külön-külön minden egyes tag állandó. Vezessük be tehát a $k_1^2 = -\frac{1}{u_1} \frac{d^2 u_1}{dx^2}$, $k_2^2 = -\frac{1}{u_2} \frac{d^2 u_2}{dy^2}$, illetve $k_3^2 = -\frac{1}{u_3} \frac{d^2 u_3}{dz^2}$ jelölést. Így a fenti (14.4) egyenlet három, az előző feladatbeli Schrödinger-egyenlettel teljesen analóg egyenletre bomlik

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_1(x)}{dx^2} + k_1^2 u_1(x) &= 0, \\ \frac{d^2 u_2(y)}{dy^2} + k_2^2 u_2(y) &= 0, \\ \frac{d^2 u_3(z)}{dz^2} + k_3^2 u_3(z) &= 0. \end{aligned} \quad (14.5)$$

Az előző szakasz eredményeit felhasználva a lehetséges k -k:

$$\begin{aligned} k_1 &= \frac{n_1 \pi}{a}, & n_1 &= 1, 2, 3, \dots \\ k_2 &= \frac{n_2 \pi}{b}, & n_2 &= 1, 2, 3, \dots \\ k_3 &= \frac{n_3 \pi}{c}, & n_3 &= 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (14.6)$$

a normált hullámfüggvények és energiák:

$$\begin{aligned} u_{n_1}(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{a}\right), & \varepsilon_{n_1} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n_1^2 & n_1 &= 1, 2, 3, \dots \\ u_{n_2}(y) &= \sqrt{\frac{2}{b}} \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{b}\right), & \varepsilon_{n_2} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mb^2} n_2^2 & n_2 &= 1, 2, 3, \dots \\ u_{n_3}(z) &= \sqrt{\frac{2}{c}} \sin\left(\frac{n_3 \pi z}{c}\right), & \varepsilon_{n_3} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mc^2} n_3^2 & n_3 &= 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (14.7)$$

A részecske teljes hullámfüggvénye és teljes energiája pedig

$$\begin{aligned} u_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{a}\right) \sqrt{\frac{2}{b}} \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{b}\right) \sqrt{\frac{2}{c}} \sin\left(\frac{n_3 \pi z}{c}\right), \\ k^2 &= k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = \pi^2 \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right), \\ \varepsilon_{n_1 n_2 n_3} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right). \end{aligned} \quad (14.8)$$

A legkisebb lehetséges energia az egydimenziós esethez hasonlóan annak felel meg, ha mindhárom n a lehető legkisebb, azaz $n_1 = n_2 = n_3 = 1$, amikor is $E_{111} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2} \right) =: E_a$, ebben az esetben ez az alapállapot energiája.

14.1. Speciális eset: kockába zárt részecske ($a = b = c$)

Ilyenkor a részecske energiája

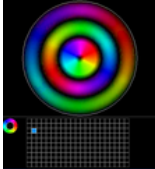
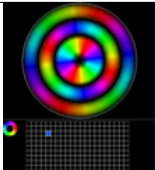
$$\varepsilon_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2). \quad (14.9)$$

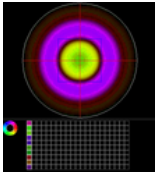
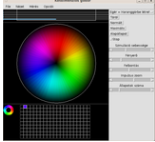
A legkisebb lehetséges energiát, csakúgy mint az általános doboz esetén, most is az $n_1 = n_2 = n_3 = 1$ esetben kapjuk, amelynek értéke $\varepsilon_{111} = 3 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} =: \varepsilon(0)$, a neki megfelelő $u_{111}(x, y, z)$ az alapállapot. Ha most megvizsgáljuk a lehetséges magasabb energiákat, akkor azt látjuk, hogy a következő energiaérték háromféleképpen is megvalósulhat az $\varepsilon_{112} = \varepsilon_{121} = \varepsilon_{211} = 6 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} =: \varepsilon(1)$ azonos, de a megfelelő $u_{112} = u_{121} = u_{211}$ sajátfüggvények különbözők, lineárisan függetlenek, sőt a (13.12) összefüggés alapján egyszerűen beláthatóan még ortogonálisak is egymásra. Ekkor azt mondjuk, hogy az adott energiasajátérték háromszorosan *degenerált*, vagy másnéven *elfajult*. Azt az egész számot, amely megadja, hogy egy adott ε energiasajátértékhez hány lineárisan független sajátfüggvény tartozik, a *degeneráció fokának* nevezzük és g_ε -nal szoktuk jelölni. A kocka esetén tehát az alapállapot nem degenerált, mert a legkisebb energiához csak az $u_{111}(x, y, z)$ függvény tartozhat, $g_{\varepsilon(0)} = 1$. Az első gerjesztett energiaérték viszont háromszorosan degenerált, $g_{\varepsilon(1)} = 3$. Mivel egy adott $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$ négyzetösszeg általában többféle $\{n_1, n_2, n_3\}$ számhármassal is előállítható, a kocka esetén az energianívók általában, (de nem mindig) degeneráltak.

Ez a fogalom minden általánosabb esetben is használatos, és megmutatható, hogy egy adott energiához tartozó g_ε számú lineárisan független degenerált állapot közül mindig képezhető g_ε számú ortogonális állapot is.

14.1 Feladat: Mutassuk meg, hogy egy degenerált energianívóhoz tartozó két különböző energiasajátfüggvény lineáris kombinációja is ugyanehhez a sajátértékhez tartozó sajátfüggvény.

14.2 Feladat: A kockába zárt részecske esetén hányadik gerjesztett nívó a $12 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ energia, és hány-szorosan degenerált? Melyik az ezt követő nívó, és az hány-szor degenerált?

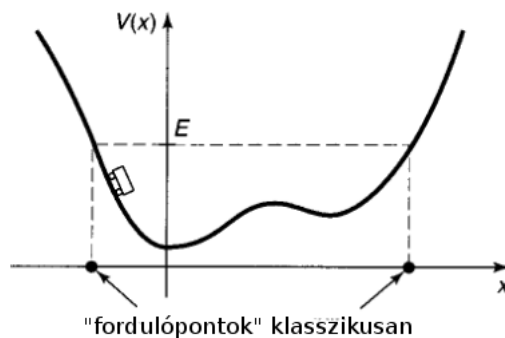
KÉTDIMENZIÓS POTENCIÁLGÖDÖR STACIONÁRIUS ÁLLAPOTAI		
		A fázis időbeli változása kétdimenziós, végtelen potenciálfalakkal határolt kör alakú doboz egyik sajátállapotában. A radiális (sugár irányú) kvantumszám 2, míg az impulzusmomentumnak az ábra síkjára merőleges vetületéhez az $m = -1$ kvantumszám tartozik. A színkódolás az alsó panel bal sarkában található, a komplex egységkörnek megfelelő ábráról olvasható le. A kis négyzetek a sajátállapotok betöltési valószínűségének és fázisának a szemléltetésére szolgálnak, esetünkben az egyetlen változó színű négyzet azt jelzi, hogy a rendszer egységnyi valószínűséggel a fenti sajátállapotban van.
		A fázis időbeli változása kétdimenziós, végtelen potenciálfalakkal határolt kör alakú doboz egyik sajátállapotában. A radiális (sugár irányú) kvantumszám 2, míg az impulzusmomentumnak az ábra síkjára merőleges vetületéhez az $m = 2$ kvantumszám tartozik.

HULLÁMCSOMAG KÉTDIMENZIÓS KÖR ALAKÚ DOBOZBAN		
		Hullámcsomag terjedése, szétfolyása majd újraegyesülése kétdimenziós, végtelen potenciálfalakkal határolt kör alakú dobozban. A kis négyzetek a sajátállapotok betöltési valószínűségének és fázisának a szemléltetésére szolgálnak, a hullámcsomagot adó szuperpozícióban maga a szín az adott állapot időfüggő fázisát, míg a fekete felé csökkenő intenzitás az amplitúdót kódolja.
KÉTDIMENZIÓS POTENCIÁLGÖDÖR		
		Ez a java applet kétdimenziós, kör keresztmetszetű végtelen potenciálgödörben mozgó kvantumos részecske dinamikáját modellezi. A további magyarázatokat és beállítási lehetőségeket illetően olvassuk el a „Részletes leírás”-t. RÉSZLETES LEÍRÁS

15. Mozgás általános egydimenziós potenciálokban

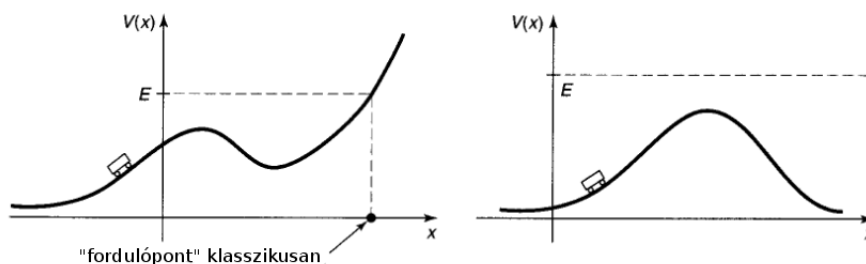
Klasszikus eset:

A klasszikus mechanikában egy időfüggetlen, egydimenziós potenciál hatására két különböző típusú mozgás lehetséges. Ha $V(x)$ mindkét oldalon nagyobb, mint a részecske teljes energiája (ε), akkor a részecske "bennragad" a potenciálgödörben, a fordulópontok között oda-vissza ingázik, de kiszabadulni nem tud (41. ábra). Az ilyen típusú állapotot nevezzük klasszikusan *kötött állapotnak*.



41. ábra. Kötött állapotokat megengedő potenciál

Ha azonban a részecske energiája ε meghaladja a $V(x)$ potenciál értékét az egyik (vagy mindkét) oldalon, akkor a részecske a "végtelenből" jön, a potenciál hatására lelassul vagy felgyorsul, majd visszatér a végtelenbe (42. ábra). Az ilyen típusú állapotokat *szórt állapotoknak* nevezzük.

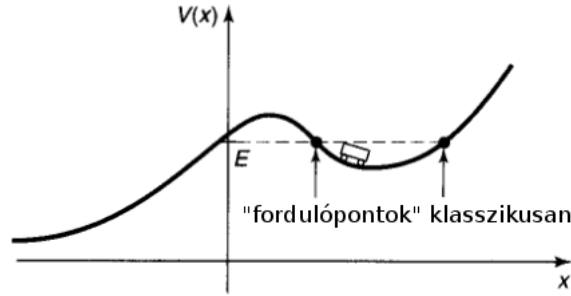


42. ábra. Szórt állapotokat megengedő potenciálok

Bizonyos potenciálok esetén csak kötött állapotok lehetségesek (mint pl. a harmonikus oszcillátor esetében), míg másoknál csak szórt állapotok (mint pl. egy olyan potenciálgát esetében, amelyen nincs bemélyedés), de vannak olyan potenciálok is, amelyeknél mindkét típusú állapot lehetséges attól függően, hogy mekkora a részecske energiája.

Kvantumos eset:

A kvantummechanikában kissé más módon különböztetjük meg a kötött és szórt állapotokat. Ugyanis, mint azt a későbbiekben látni fogjuk, a kvantummechanika szerint annak is van valószínűsége, hogy egy részecske egy véges magasságú potenciálgáton "átszivárogon", annak ellenére, hogy az energiája kisebb, mint a potenciálgát magassága. Ezt nevezzük *alagúteffektusnak*.



43. ábra. Klasszikusan kötött, kvantumosan szórt állapot. Ha a részecske kezdetben a potenciál helyi minimumánál van lokalizálva és energiája nem elegendő ahhoz, hogy a negatív tengely irányába megmássza a potenciál hegyet, akkor klasszikusan mindig ebben a lokális gödörben marad. A kvantummechanika szerint viszont a részecske véges valószínűséggel átjuthat ezen az akadályon és elmehet a mínusz végtelen felé. Ezt *alagúteffektusnak* nevezzük.

Vagyis ami itt számít, az a potenciál végtelenben felvett értéke:

$$\varepsilon < V(-\infty) \text{ és } \varepsilon < V(\infty) \implies \text{kötött állapot,} \quad (15.1)$$

$$\varepsilon > V(-\infty) \text{ vagy } \varepsilon > V(\infty) \implies \text{szórt állapot.} \quad (15.2)$$

Azon potenciálok esetében, melyek a végtelenben nullába tartanak, a fenti kritériumok tovább egyszerűsödnek:

$$\varepsilon < 0 \implies \text{kötött állapot,} \quad (15.3)$$

$$\varepsilon > 0 \implies \text{szórt állapot.} \quad (15.4)$$

Mivel az előző szakaszban vizsgált végtelen magas falú potenciálgödör $x \rightarrow \pm\infty$ esetén a végtelenbe tart, ezért abban az esetben csak kötött állapotok lehetségesek. Ugyancsak kizárólag kötött állapotai vannak a harmonikus oszcillátor $Dx^2/2$ potenciáljában mozgó kvantumos részecskének, mert ez sem tud elszaladni a végtelenbe. Viszont egy szabad részecske mindenhol nulla potenciálban mozog, ebben az esetben csakis szórt állapotok lehetségesek.

Legyen egy olyan potenciálunk, amely $x \rightarrow \pm\infty$ estén nullához tart, és a deriváltja is nullához megy. A szórt állapotokról a következőt mondhatjuk. Az $x \rightarrow \pm\infty$ esetén a részecskére nem hat erő, tehát szabad részecskeként viselkedik, azaz az energiasajátérték-egyenlet megoldása ott az e^{ikx} és az e^{-ikx} , de Broglie-féle hullámok valamilyen lineáris kombinációjához tart, ahol mint láttuk $k = \sqrt{2m\varepsilon/\hbar^2}$. Figyelembe véve a stacionárius állapot időfüggését, e^{ikx} a pozitív, e^{-ikx} pedig a negatív x irányba $p = \hbar k$ impulzusú részecskét jelent. Annak a fizikai szituációnak, hogy a potenciális energia nem nulla tartományába az $x = -\infty$ felől (balról) érkezik egy részecske és azután bizonyos valószínűséggel továbbhalad az $x = \infty$ felé, illetve bizonyos valószínűséggel visszaverődik,

az a határföltétel felel meg, hogy

$$x \rightarrow -\infty \quad u_k(x) = e^{ikx} + r(k)e^{-ikx}, \quad (15.5)$$

$$x \rightarrow \infty \quad u_k(x) = t(k)e^{ikx}, \quad (15.6)$$

ahol r a visszaverődés (reflexió), t pedig az áthatolás (transzmisszió) *amplitúdója*. Ezek konkrét értéke, amelyet a potenciál konkrét alakja határoz meg, függ a k -tól, azaz az energiától is. A feladat itt általában éppen a t és az r meghatározása. Az eljárás menetét alább majd példák segítségével mutatjuk be.

Az áthatolás valószínűségét a T transzmissziós, a visszaverődés valószínűségét pedig az R reflexiós együttható adja meg, melyek a $\varphi_t(x) = t(k)e^{ikx}$ áthaladt, illetve a $\varphi_r(x) = r(k)e^{-ikx}$ visszavert és a beeső $\varphi_i(x) = e^{ikx}$ hullám valószínűségi áramsűrűségeinek hányadosaival vannak definiálva:

$$T = \left| \frac{j_t}{j_i} \right|, \quad R = \left| \frac{j_r}{j_i} \right|. \quad (15.7)$$

A valószínűségi áramsűrűségeket a korábbiak (9.8) szerint az alábbi összefüggésből számíthatjuk ki:

$$j(x) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\varphi^*(x) \frac{d\varphi(x)}{dx} - \varphi(x) \frac{d\varphi^*(x)}{dx} \right]. \quad (15.8)$$

A valószínűség megmaradásából következően fönn kell állnia a $|j_i| = |j_t| + |j_r|$, illetve a $T + R = 1$ összefüggéseknek.

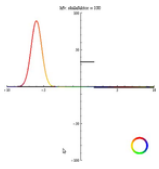
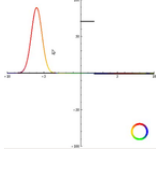
Az itt leírt eredmények arra az esetre vonatkoznak, ha a potenciálon szóródó részecske jó közelítéssel meghatározott energiájú. A (15.5) és (15.6) aszimptotikus föltételt kielégítő függvények azonban nyilvánvalóan nem normálhatók, hasonlóan a de Broglie-féle hullámokhoz.

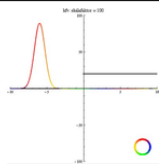
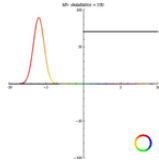
Egy valódi részecskét viszont nem egy de Broglie hullámmal, hanem ezeknek olyan szuperpozíciójával írunk le, amely térben többé-kevésbé lokalizált. Az ilyen valódi normálható hullámfüggvénnyel jellemzett részecske szóródásának időfüggésének leírásakor a következőképpen kell eljárni. A kezdeti hullámfüggvényt kifejtjük a stacionárius állapotokon, amelyek időfejlődését a megfelelő $e^{-i\varepsilon t/\hbar}$ tényezővel szorozva kapjuk meg. A Schrödinger-egyenlet linearitása miatt ezután a megoldást az egyes stacionárius komponensek korábban már a (12.10) alatt látott

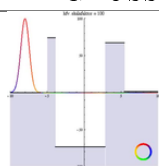
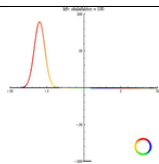
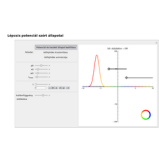
$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n u_n(x) e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} + \int c(\varepsilon) u_\varepsilon(x) e^{-i\varepsilon t/\hbar} d\varepsilon \quad (15.9)$$

alakú szuperpozíciójával kapjuk meg. Ennek a tényleges végigvitele legtöbbször csak numerikusan lehetséges.

Ilyen feladatok megoldását mutatják az alábbi animációk:

GAUSS-CSOMAG SZÓRÓDÁSA POTENCIÁLGÁTON		
		Gauss típusú hullámfüggvénnyel modellezett részecske ütközik egy potenciálgátnak, melynek magassága kisebb, mint a mozgási energia várható értéke ebben az állapotban. A gáton való áthaladás valószínűsége nagyobb, mint a visszaverődésé. Egy klasszikus részecske ez esetben biztosan át tud menni a gáton.
		Gauss típusú hullámfüggvénnyel modellezett részecske ütközik egy potenciálgátnak, amelynek magassága nagyobb, mint a mozgási energia várható értéke ebben az állapotban. A gáton való áthaladás valószínűsége kisebb, mint a visszaverődésé. Egy klasszikus részecske ebben az esetben biztosan nem jut át a gáton, a kvantum mozgást éppen ezért alagúteffektusnak nevezzük.

GAUSS-CSOMAG SZÓRÓDÁSA POTENCIÁLFALON		
		Gauss típusú hullámfüggvénnyel modellezett részecske ütközik egy potenciálfalnak, melynek magassága kisebb, mint a mozgási energia várható értéke ebben az állapotban. A részecske nagy valószínűséggel "felmegy a falon", míg – kis valószínűséggel ugyan – de vissza is verődik, ami klasszikusan nem történhet meg.
		Gauss típusú hullámfüggvénnyel modellezett részecske ütközik egy potenciálfalnak, melynek magassága nagyobb, mint a mozgási energia várható értéke ebben az állapotban. A részecske nagy valószínűséggel visszafordul, míg – kis valószínűséggel ugyan – de megtalálható a fal belsejében is.

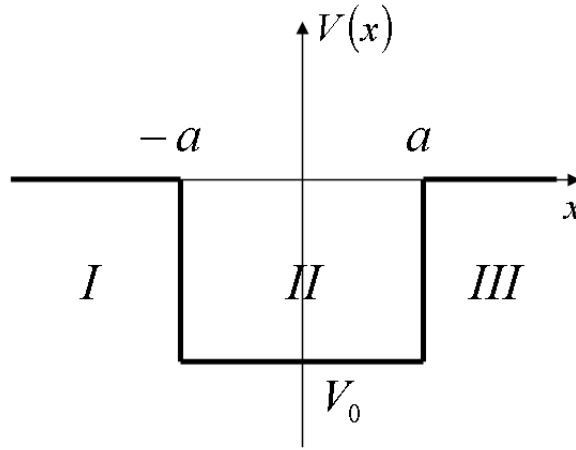
GAUSS-CSOMAG SZÓRÓDÁSA LÉPCSŐS POTENCIÁLON		
		Gauss típusú hullámfüggvénnyel modellezett részecske érkezik egy bonyolultabb lépcsős potenciálhoz, egy két oldalról gáttal körülvett gödörhöz.
		Gauss típusú hullámfüggvénnyel modellezett részecske érkezik vonzó potenciál gödörhöz. A részecske bizonyos valószínűséggel visszaverődik a gödörről, ami klasszikusan nem történhetne meg.
		Ezzel az interaktív animációval tetszőleges lépcsős potenciált hozhatunk létre, majd megnézhetjük, hogy az általunk felépített potenciálon hogyan szóródik egy Gauss-csomag. A kezdeti Gauss-csomag jellemzői (impulzusának és koordinátájának várható értéke, illetve a koordináta szórása) szintén állíthatóak.

16. Véges magasságú, szimmetrikus potenciálgödörben lévő részecske

Vizsgáljuk most példaként a következő szimmetrikus, $2a$ szélességű, V_0 mélységű potenciálgödör hatása alatt mozgó részecskét.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } |x| \geq a \\ V_0 (< 0) & \text{ha } |x| < a \end{cases} \quad (16.1)$$

ahol $a > 0$.



44. ábra. Szimmetrikus potenciálgödör

Ebben az esetben a részecske lehet kötött állapotban a gödör belsejében, ha az energiája negatív, de vannak szórt állapotok is, amikor a részecske energiája pozitív, ekkor pl. a negatív x tengely felől érkező részecske állapotát a gödör megváltoztatja. Látni fogjuk, hogy ilyenkor a klasszikus esettel szemben – amikor a részecske egyszerűen áthalad a potenciálgödörön – a kvantumos esetben annak is van véges valószínűsége, hogy a részecske visszaverődik.

16.1. Kötött állapotok

Keressük a részecske *kötött állapotait*, azaz jelen esetben a $V_0 < \varepsilon < 0$ energiájú állapotokat. (Könnyen ellenőrizhető, hogy az $\varepsilon = V_0$ eset azonosan nulla hullámfüggvényre vezetne, ezért zárjuk ezt ki). Mivel most a potenciál fala nem végtelen magas, a részecske hullámfüggvényéről nem állíthatjuk, hogy az azonosan nulla a völgyön kívül. Meg kell tehát oldanunk az energiasajátérték-egyenletét a teljes térre (mivel most egydimenzióban vagyunk: az x koordináta egyenesre) vonatkozóan. Ehhez bontsuk a lehetséges x értékeket 3 tartományra.

I. tartomány ($x < -a$):

Ebben a tartományban $V(x) = 0$, vagyis az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet a következő alakú:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_I(x)}{dx^2} = \varepsilon u_I(x). \quad (16.2)$$

Átrendezve ezt, az alábbi egyenletet kapjuk:

$$\frac{d^2 u_I(x)}{dx^2} + \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} u_I(x) = 0. \quad (16.3)$$

Bevezetve a $\kappa = \sqrt{-\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} > 0$ pozitív paramétert (hiszen $\varepsilon < 0$ energiájú részecskét vizsgálunk), a Schrödinger-egyenlet a következő egyszerű alakot ölti:

$$\frac{d^2 u_I(x)}{dx^2} - \kappa^2 u_I(x) = 0. \quad (16.4)$$

Ennek az egyenletnek a megoldása

$$u_I(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x}, \quad (16.5)$$

ahol A és B egyelőre ismeretlen konstansok.

Ennek a hullámfüggvénynek azonban a $-\infty$ -ben lecsengőnek kell lennie:

$$u_I(-\infty) = 0. \quad (16.6)$$

Mivel u_I -ben az $e^{\kappa x}$ -es tag $-\infty$ -ben eleve lecseng, az $e^{-\kappa x}$ -es tag viszont végtelen nagygyá válik, a fenti feltétel akkor teljesíthető, ha $A = 0$. A megoldásunk erre a tartományra tehát

$$u_I(x) = Be^{\kappa x} \quad (16.7)$$

alakú.

II. tartomány ($-a < x < a$):

Ebben a tartományban $V(x) = V_0$, vagyis az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet a következő alakú:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_{II}(x)}{dx^2} + V_0 u_{II}(x) = \varepsilon u_{II}(x). \quad (16.8)$$

Átrendezve:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_{II}(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V_0 u_{II}(x) &= -\frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon u_{II}(x), \\ \frac{d^2 u_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2} u_{II}(x) &= 0. \end{aligned}$$

Mivel $V_0 < \varepsilon < 0$, ezért $\varepsilon - V_0 > 0$. Vezessük most be a $k = \sqrt{\frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2}} > 0$ pozitív paramétert, amellyel a Schrödinger-egyenlet az alábbi alakra egyszerűsödik:

$$\frac{d^2 u_{II}(x)}{dx^2} + k^2 u_{II}(x) = 0. \quad (16.9)$$

Ennek a differenciálegyenletnek a megoldása

$$u_{II}(x) = C \sin(kx) + D \cos(kx), \quad (16.10)$$

ahol C és D a peremfeltételekből meghatározható konstansok.

III. tartomány ($x > a$):

Ebben a tartományban $V(x) = 0$ ismét, vagyis az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet ugyanolyan alakú, mint az I . tartományban:

$$\frac{d^2 u_{III}(x)}{dx^2} - \kappa^2 u_{III}(x) = 0, \quad (16.11)$$

itt is $\kappa = \sqrt{-\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} > 0$. Ennek az egyenletnek az általános megoldása (csakúgy, mint az I . tartományban)

$$u_{III}(x) = Fe^{-\kappa x} + Ge^{\kappa x}, \quad (16.12)$$

de mivel ettől a hullámfüggvénytől is elvárjuk, hogy a $+\infty$ -ben lecsengő legyen (mely feltételt az $e^{-\kappa x}$ -es tag igen, de az $e^{\kappa x}$ -es tag nem teljesít) nyerjük, hogy

$$u_{III}(\infty) = 0 \implies G = 0. \quad (16.13)$$

A peremfeltételt teljesítő megoldás ebben a tartományban tehát:

$$u_{III}(x) = Fe^{-\kappa x}. \quad (16.14)$$

Összefoglalva tehát a megoldások alakja a három tartományban:

$$\begin{aligned} u_I(x) &= Be^{\kappa x}, \quad (\text{ha } x < -a) \\ u_{II}(x) &= C \sin(kx) + D \cos(kx), \quad (\text{ha } -a < x < a) \\ u_{III}(x) &= Fe^{-\kappa x}, \quad (\text{ha } x > a). \end{aligned} \quad (16.15)$$

Most pedig a peremföltételek segítségével össze fogjuk *illesztetni* a megoldásokat az $x = \pm a$ helyeken. A fizikailag megfelelő peremföltételek a következők: előírjuk, hogy a megoldás és annak deriváltja legyen folytonos a tartományok határán is. Az egyéb helyeken ez a fenti függvényekből láthatóan automatikusan teljesül.

Tekintsük ugyanis a $V(x)$ -et illetve annak véges ugrásait egy olyan folytonos, sima függvény határesetének, amely az illesztési helyeken nagyon meredeken változik. Sima V esetén az u -nak minden pontban kétszer differenciálható függvénynek kell lennie, hiszen az egyenlet az u második deriváltját tartalmazza. Az u simaságából amit lehet akkor is megtartunk, ha a potenciál nem folytonos. Emiatt írjuk elő, hogy az u legyen folytonos és egyszer differenciálható ott is, ahol V ugrik. A második derivált ebben az esetben már nem lehet folytonos, mert az egyenletben a potenciális energia ugrását ennek kell kompenzálnia. Megmutatható, hogy abban a néha szintén előforduló esetben, amikor a potenciál ugrása végtelen, az u folytonossága még mindig előírható, de ez esetben az u deriváltjának folytonossága már nem.

Ahhoz tehát, hogy a részecske hullámfüggvénye a teljes x tengelyen folytonos és differenciálható függvény legyen, előírjuk a következőket:

$$I. \text{ és } II. \text{ határán} \quad \left\{ \begin{array}{l} u_I(-a) = u_{II}(-a) \\ \left. \frac{du_I}{dx} \right|_{x=-a} = \left. \frac{du_{II}}{dx} \right|_{x=-a} \end{array} \right., \quad (16.16)$$

$$II. \text{ és } III. \text{ határán} \quad \left\{ \begin{array}{l} u_{II}(a) = u_{III}(a) \\ \left. \frac{du_{II}}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{du_{III}}{dx} \right|_{x=a} \end{array} \right., \quad (16.17)$$

melyek az alábbi egyenletekre vezetnek:

$$\left. \begin{array}{l} Be^{-\kappa a} = -C \sin(ka) + D \cos(ka) \\ \kappa Be^{-\kappa a} = k[C \cos(ka) + D \sin(ka)] \end{array} \right\}, \quad (16.18)$$

$$\left. \begin{array}{l} Fe^{-\kappa a} = C \sin(ka) + D \cos(ka) \\ \kappa Fe^{-\kappa a} = k[-C \cos(ka) + D \sin(ka)] \end{array} \right\}. \quad (16.19)$$

Elimináljuk D -t a fenti egyenletekből! Ehhez vonjuk ki (16.19) első egyenletéből (16.18) első egyenletét, illetve (16.18) második egyenletéből (16.19) második egyenletét, ekkor kapjuk:

$$\left. \begin{array}{l} (F - B)e^{-\kappa a} = 2C \sin(ka) \\ -\kappa(F - B)e^{-\kappa a} = 2kC \cos(ka) \end{array} \right\}. \quad (16.20)$$

Hasonlóan, most adjuk össze (16.18) első (második) egyenletét (16.19) első (második) egyenletével:

$$\left. \begin{array}{l} (F + B)e^{-\kappa a} = 2D \cos(ka) \\ \kappa(F + B)e^{-\kappa a} = 2kD \sin(ka) \end{array} \right\}. \quad (16.21)$$

Ha $C \neq 0$, akkor (16.20)-ból láthatóan $F \neq B$ és (16.20) egyenleteinek hányadosa az alábbi egyenletre vezet:

$$k \cot(ka) = -\kappa. \quad (16.22)$$

Ha $D \neq 0$, akkor (16.21)-ből látszik, hogy $F \neq -B$ és (16.21) egyenleteinek hányadosából

$$k \tan(ka) = \kappa. \quad (16.23)$$

A fenti (16.22) és (16.23) egyenletek *nem teljesíthetők egyszerre*. Tegyük föl ugyanis az ellenkezőjét, és írjuk be κ helyére $k \tan(ka)$ -t (16.22)-ben. Ez a $\tan^2(ka) = -1$ egyenletre vezet, $\tan(ka)$ viszont valós, így ellentmondásra jutunk. Két típusú megoldást különböztethetünk meg tehát:

$$\begin{aligned} (1) \quad & C = 0, \quad F = B \quad \text{és} \quad k \tan(ka) = \kappa \\ (2) \quad & D = 0, \quad F = -B \quad \text{és} \quad k \cot(ka) = -\kappa \end{aligned} \quad (16.24)$$

A megoldások **(1)** csoportjában a részecske hullámfüggvénye **páros** függvény, míg a **(2)** csoportban **páratlan** függvény. (Ez a tulajdonság egyébként következik abból, hogy a potenciál $x = 0$ -ra nézve szimmetrikus, azaz $V(-x) = V(x)$. Hiszen ekkor a részecskének a potenciálvölgy $x < 0$ oldalán való megtalálási valószínűsége meg kell hogy egyezzen a potenciálvölgy $x > 0$ oldalán való megtalálási valószínűségével, azaz $|u(-x)|^2 = |u(x)|^2$, melyből pedig következik, hogy $u(-x) = \pm u(x)$, vagyis a hullámfüggvény páros, vagy páratlan függvény.)

Az **(1)** ill. **(2)** esetekben a részecske kötött állapotainak energiaszintjei a (16.23), ill. (16.22) egyenletek grafikus megoldásával határozhatók meg. Ehhez vezessük be a következő jelölést:

$$\begin{aligned} X &= ka, \\ Y &= \kappa a, \end{aligned} \tag{16.25}$$

ahol $X, Y > 0$, hiszen $k = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} > 0$ és $\kappa = \sqrt{-\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} > 0$. Mivel

$$X^2 = k^2 a^2 = \frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2} a^2, \tag{16.26}$$

és

$$Y^2 = \kappa^2 a^2 = -\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} a^2, \tag{16.27}$$

ezekből előállíthatunk egy olyan konstanst, amelyik csak a megadott $V_0 < 0$ és a paraméterektől függ:

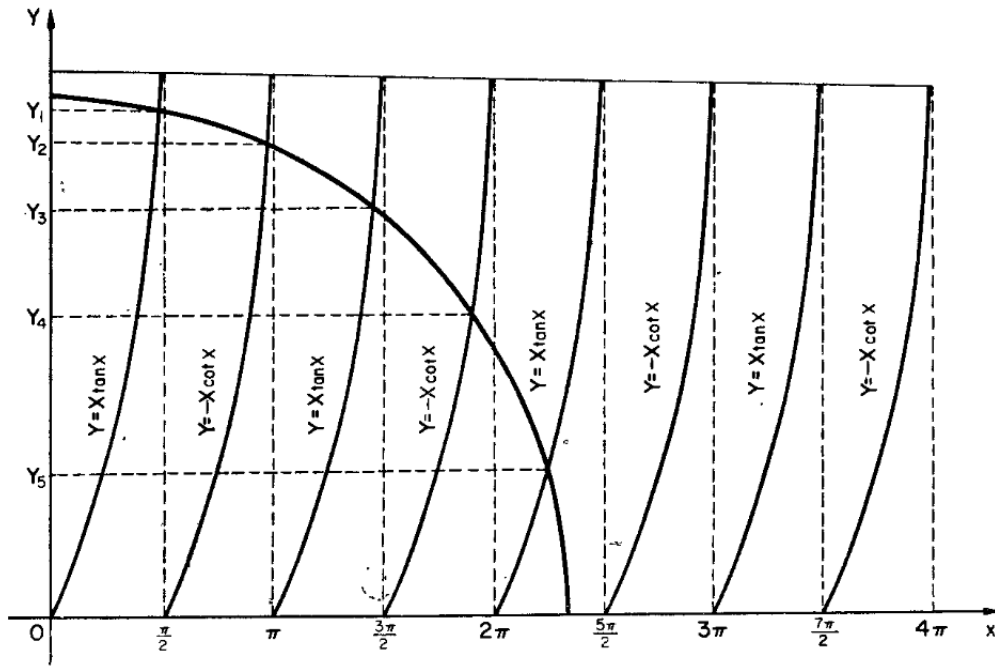
$$\begin{aligned} X^2 + Y^2 &= \frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2} a^2 - \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} a^2 \\ &= \frac{2m(\varepsilon - V_0 - \varepsilon)}{\hbar^2} a^2 = -\frac{2ma^2 V_0}{\hbar^2} \\ &= \frac{2ma^2 |V_0|}{\hbar^2} = R^2. \end{aligned} \tag{16.28}$$

Így a lehetséges $\varepsilon = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}$ energiaszinteket az **(1)** és **(2)** esetekben az

$$(1) \quad \begin{cases} X \tan X = Y \\ X^2 + Y^2 = \frac{2ma^2 |V_0|}{\hbar^2} \end{cases} \tag{16.29}$$

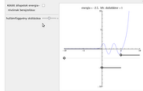
$$(2) \quad \begin{cases} X \cot X = -Y \\ X^2 + Y^2 = \frac{2ma^2 |V_0|}{\hbar^2} \end{cases} \tag{16.30}$$

görbék ($X > 0$, $Y > 0$ tartománybeli) metszéspontjainak megfelelő Y értékekből határozhatjuk meg, ahogyan azt az alábbi ábra is mutatja.



45. ábra. A kötött állapotok energiaszintjeinek meghatározása grafikus megoldással

Az ábráról és az R -re vonatkozó (16.28) kifejezésből láthatjuk, hogy a kötött állapotok száma $a^2 |V_0|$ -al növekszik, és véges, ha $a^2 |V_0|$ véges. Az ábra vízszintes tengelyéről leolvasható, hogy ha $\frac{N}{2}\pi \leq R \leq \frac{N+1}{2}\pi$, (ahol $N = 0, 1, 2, \dots$) akkor a kötött állapotok száma $N + 1$, vagy másképpen $\left[\frac{2}{\pi}R\right] + 1 = \left[\frac{2}{\pi} \left(\frac{2ma^2|V_0|}{\hbar^2}\right)^{1/2}\right] + 1$, ahol a szögletes zárójelek a köztük lévő szám egész részét jelentik. Látható, hogy mindig van legalább egy kötött állapot.

LÉPCSŐS POTENCIÁL KÖTÖTT ÁLLAPOTAI		
		A program lehetőséget biztosít tetszés szerinti lépcsős potenciál beállítására. Egy adott potenciált beállítva megkereshetjük a kötött állapotokhoz tartozó energiasajátértékeket és -sajátállapotokat.

16.2. Szórt állapotok

Keressük most a 44. ábrán látható potenciálban a részecske *szórt* stacionárius állapotait, azaz az $\varepsilon > 0$ sajátértékekhez tartozó megoldásokat. Ehhez ismét meg kell oldanunk az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet az *I*, *II*, *III* tartományokon.

I. tartomány ($x < -a$):

Ebben a tartományban $V(x) = 0$, vagyis az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet a következő alakú:

$$\frac{d^2 u_I(x)}{dx^2} + \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} u_I(x) = 0. \quad (16.31)$$

Bevezetve a $k = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} > 0$ pozitív paramétert (hiszen $\varepsilon > 0$ energiájú részecskét vizsgálunk), egyenletünk a következő egyszerű alakot ölti:

$$\frac{d^2 u_I(x)}{dx^2} + k^2 u_I(x) = 0, \quad (16.32)$$

melynek általános megoldása

$$u_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (16.33)$$

ahol A és B konstansok.

II. tartomány ($-a < x < a$):

Ebben a tartományban $V(x) = V_0$, vagyis a sajátérték-egyenlet a következő alakú:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_{II}(x)}{dx^2} + V_0 u_{II}(x) = \varepsilon u_{II}(x). \quad (16.34)$$

Átrendezve:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_{II}(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V_0 u_{II}(x) &= -\frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon u_{II}(x), \\ \frac{d^2 u_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2} u_{II}(x) &= 0. \end{aligned}$$

Mivel $V_0 < 0$ és $\varepsilon > 0$, ezért $\varepsilon - V_0 > 0$. Vezessük most be a $q = \sqrt{\frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2}} > 0$ pozitív paramétert, amellyel a Schrödinger-egyenlet az alábbi alakra egyszerűsödik:

$$\frac{d^2 u_{II}(x)}{dx^2} + q^2 u_{II}(x) = 0. \quad (16.35)$$

Ennek a differenciálegyenletnek általános megoldását most célszerű az

$$u_{II}(x) = C \sin(qx) + D \cos(qx), \quad (16.36)$$

alakba írni, ahol C és D konstansok.

III. tartomány ($x > a$):

Ebben a tartományban az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet ugyanolyan alakú, mint az I . tartományban:

$$\frac{d^2 u_{III}(x)}{dx^2} + k^2 u_{III}(x) = 0, \quad (16.37)$$

itt is $k = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} > 0$. Ennek az egyenletnek az általános megoldása (csakúgy, mint az I . tartományban)

$$u_{III}(x) = F e^{ikx} + G e^{-ikx}. \quad (16.38)$$

A továbbiakban feltesszük, hogy a potenciálgödörre jobbról nem érkezik hullám, azaz

$$G = 0.$$

A megoldás ebben a tartományban tehát:

$$u_{III}(x) = F e^{ikx}. \quad (16.39)$$

Összefoglalva a megoldásokat a három tartományban:

$$\begin{aligned} u_I(x) &= A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad (\text{ha } x < -a) \\ u_{II}(x) &= C \sin(qx) + D \cos(qx), \quad (\text{ha } -a < x < a) \\ u_{III}(x) &= F e^{ikx}, \quad (\text{ha } x > a). \end{aligned} \quad (16.40)$$

Illesztés az I . és II . tartományok határán:

Mivel a hullámfüggvénynek folytonosnak és differenciálhatónak kell lennie, az alábbi egyenleteknek kell teljesülniük:

$$\begin{aligned} u_I(-a) &= u_{II}(-a) \\ \left. \frac{du_I}{dx} \right|_{x=-a} &= \left. \frac{du_{II}}{dx} \right|_{x=-a} \end{aligned} \quad (16.41)$$

melyekből:

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = -C \sin(qa) + D \cos(qa), \quad (16.42)$$

$$ik \left(Ae^{-ika} - Be^{ika} \right) = q (C \cos(qa) + D \sin(qa)). \quad (16.43)$$

Illesztés a *II.* és *III.* tartományok határán:

Itt az alábbi egyenleteknek kell teljesülniük:

$$\begin{aligned} u_{II}(a) &= u_{III}(a) \\ \left. \frac{du_{II}}{dx} \right|_{x=a} &= \left. \frac{du_{III}}{dx} \right|_{x=a} \end{aligned} \quad (16.44)$$

melyekből:

$$Fe^{ika} = C \sin(qa) + D \cos(qa), \quad (16.45)$$

$$ikFe^{ika} = q (C \cos(qa) - D \sin(qa)). \quad (16.46)$$

Transzmissziós együttható:

A transzmissziós együttható meghatározásához használjuk ismét a 15. fejezetben leírtakat. Most az áthaladt hullám maga az $u_{III}(x)$, hiszen ez csak az x -tengely pozitív irányába haladó hullámot tartalmaz (feltettük, hogy jobbról nem érkezik hullám a potenciálgödörre). A neki megfelelő valószínűségi áramsűrűség a következő

$$j_t = \frac{\hbar k}{m} |F|^2. \quad (16.47)$$

A bejövő hullám nem más, mint $u_I(x)$ -nek az x -tengely pozitív irányába haladó része, azaz Ae^{ikx} . A hozzá tartozó áramsűrűség:

$$j_i = \frac{\hbar k}{m} |A|^2. \quad (16.48)$$

Megjegyezzük, hogy most a bejövő és kimenő hullámok hullámszáma megegyezik. Így a transzmissziós együttható az alábbi, igen egyszerű alakot ölti:

$$T = \left| \frac{j_t}{j_i} \right| = \left| \frac{F}{A} \right|^2. \quad (16.49)$$

Vagyis megegyezik a két hullám amplitúdója hányadosának abszolútérték-négyzetével.

T kiszámításához a (16.42-16.46) egyenletekből ki kell fejeznünk F -et, mint A függvényét. Ehhez először fejezzük ki C -t és D -t, mint F függvényét (16.45) és (16.46)-ból. C -t megkaphatjuk, ha (16.45)-öt megszorozzuk $\sin(qa)$ -val, (16.46)-ot pedig $\cos(qa)$ -val, majd összeadjuk őket, melyből:

$$C = Fe^{ika} \left[\sin(qa) + \frac{ik}{q} \cos(qa) \right]. \quad (16.50)$$

D -t teljesen hasonlóan, megkaphatjuk, ha (16.45)-öt megszorozzuk $\cos(qa)$ -val, (16.46)-ot pedig $\sin(qa)$ -val, majd kivonjuk őket egymásból:

$$D = Fe^{ika} \left[\cos(qa) - \frac{ik}{q} \sin(qa) \right]. \quad (16.51)$$

Ezután helyettesítsük be (16.50)-et és (16.51)-et (16.42)-be és (16.43)-ba:

$$\begin{aligned}
Ae^{-ika} + Be^{ika} &= -Fe^{ika} \left[\sin(qa) + \frac{ik}{q} \cos(qa) \right] \sin(qa) \\
&\quad + Fe^{ika} \left[\cos(qa) - \frac{ik}{q} \sin(qa) \right] \cos(qa) \\
&= Fe^{ika} \left[\cos(2qa) - \frac{ik}{q} \sin(2qa) \right],
\end{aligned} \tag{16.52}$$

$$\begin{aligned}
Ae^{-ika} - Be^{ika} &= \frac{q}{ik} \left(Fe^{ika} \left[\sin(qa) + \frac{ik}{q} \cos(qa) \right] \cos(qa) \right. \\
&\quad \left. + Fe^{ika} \left[\cos(qa) - \frac{ik}{q} \sin(qa) \right] \sin(qa) \right) \\
&= \frac{q}{ik} Fe^{ika} \left[\sin(2qa) + \frac{ik}{q} \cos(2qa) \right].
\end{aligned} \tag{16.53}$$

A fenti (16.52) és (16.53) egyenletek összeadásával kapjuk:

$$\begin{aligned}
2Ae^{-ika} &= Fe^{ika} \left[\cos(2qa) - \frac{ik}{q} \sin(2qa) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{q}{ik} \sin(2qa) + \cos(2qa) \right] \\
&= Fe^{ika} \left[2 \cos(2qa) + \sin(2qa) \left(\frac{q}{ik} - \frac{ik}{q} \right) \right] \\
&= Fe^{ika} \left[2 \cos(2qa) + \frac{q^2 + k^2}{ikq} \sin(2qa) \right] \\
&= Fe^{ika} \left[2 \cos(2qa) - 2i \frac{q^2 + k^2}{2kq} \sin(2qa) \right],
\end{aligned} \tag{16.54}$$

melyből kifejezve F -et:

$$F = \frac{Ae^{-2ika}}{\cos(2qa) - i \frac{q^2 + k^2}{2kq} \sin(2qa)}. \tag{16.55}$$

Ebből pedig a transzmisszió:

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{\frac{|A|^2}{\cos^2(2qa) + \left(\frac{q^2 + k^2}{2kq} \right)^2 \sin^2(2qa)}}{|A|^2}, \tag{16.56}$$

azaz

$$T = \frac{1}{\cos^2(2qa) + \left(\frac{q^2 + k^2}{2kq} \right)^2 \sin^2(2qa)}. \tag{16.57}$$

Alakítsuk át kissé a nevezőt:

$$\begin{aligned}
\cos^2(2qa) + \left(\frac{q^2 + k^2}{2kq} \right)^2 \sin^2(2qa) &= 1 - \sin^2(2qa) + \left(\frac{q^2 + k^2}{2kq} \right)^2 \sin^2(2qa) \\
&= 1 + \left(\frac{q^4 + 2k^2q^2 + k^4}{4k^2q^2} - 1 \right) \sin^2(2qa) \\
&= 1 + \frac{q^4 - 2k^2q^2 + k^4}{4k^2q^2} \sin^2(2qa) \\
&= 1 + \frac{(q^2 - k^2)^2}{4k^2q^2} \sin^2(2qa).
\end{aligned} \tag{16.58}$$

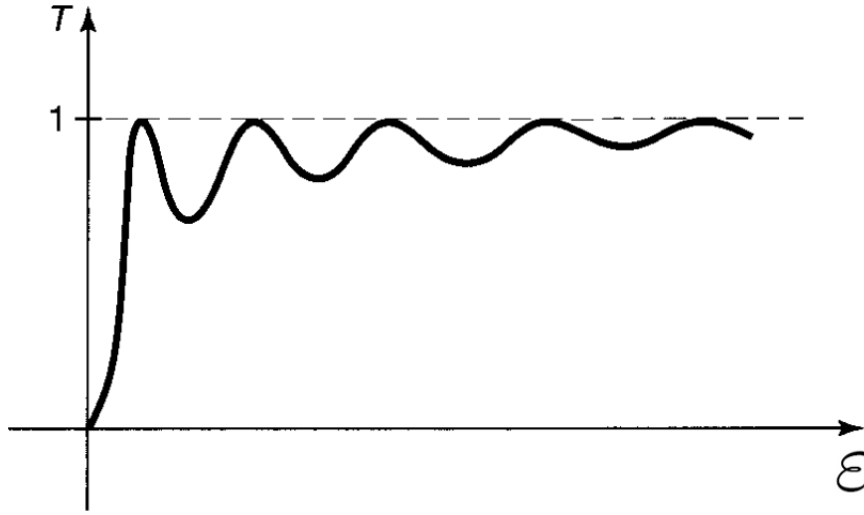
Mivel $q^2 = \frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2}$ és $k^2 = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}$, megadhatjuk T -t, mint a , V_0 és ε függvényét, ugyanis:

$$\begin{aligned}(q^2 - k^2)^2 &= \left(-\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2 = \frac{4m^2V_0^2}{\hbar^4}, \\ 4k^2q^2 &= \frac{16m^2\varepsilon(\varepsilon - V_0)}{\hbar^4},\end{aligned}\tag{16.59}$$

melynek felhasználásával

$$\begin{aligned}T &= \frac{1}{1 + \frac{(q^2 - k^2)^2}{4k^2q^2} \sin^2(2qa)} \\ &= \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4\varepsilon(\varepsilon - V_0)} \sin^2\left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(\varepsilon - V_0)}\right)}.\end{aligned}\tag{16.60}$$

Az alábbi ábra mutatja a transzmisszió függését a részecske energiájának függvényében.



46. ábra. A transzmisszió a részecske energiájának függvényében

A transzmisszió tökéletes ($T = 1$), ha

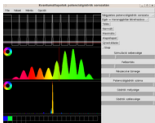
$$\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(\varepsilon_n - V_0)} = n\pi,\tag{16.61}$$

ahol n tetszőleges egész szám. Ebből

$$\varepsilon_n - V_0 = \varepsilon_n + |V_0| = \left(\frac{n\pi\hbar}{2a}\right)^2 \frac{1}{2m}\tag{16.62}$$

azaz a transzmisszió tökéletes, ha a részecske energiájának és a potenciálgödör mélységének összege éppen egybeesik az ugyanolyan szélességű, de végtelenül mély potenciálgödör valamely energiaszintjével.

LÉPCSŐS POTENCIÁL SZÓRT ÁLLAPOTAI		
		A program lehetőséget biztosít tetszés szerinti lépcsős potenciál beállítására. Egy adott potenciált beállítva állíthatjuk a szórt állapot energiáját, az adott energiához tartozó állapot hullámfüggvénye pedig fázis szerinti színezéssel jelenik meg.

KVANTUMÁLLAPOTOK POTENCIÁLGÖDRÖK SOROZATÁN		
		Ez a java applet egydimenziós, kváziperiodikusan ismétlődő potenciálokban mozgó kvantumos részecske dinamikáját mutatja. A további magyarázatokat és beállítási lehetőségeket illetően olvassuk el a „Részletes leírás”-t. RÉSZLETES LEÍRÁS

17. A kvantummechanika szabályai

Az atomnyalábokon végzett Stern-Gerlach típusú kísérletekből, a fotonok polarizációjára vonatkozó tapasztalatokból, a Jönsson-Tonomura-féle kétréses elektroninterferenciás kísérletből, amely a részecskék helyére vonatkozóan mutatta a valószínűségi amplitúdók interferenciájának lehetőségét, és számos egyéb kísérleti tapasztalat alapján meg lehet fogalmazni a kvantummechanika olyan matematikai modelljét, amellyel jelenlegi tudásunk szerint minden kvantumos jelenséget le lehet írni.

A későbbiek során egy komolyabb szintű posztulátumrendszert is meg fogunk fogalmazni, itt csak a kvantummechanika „működésére” vonatkozó legfontosabb szabályokat foglaljuk össze.

1. Egy kvantumfizikai rendszer állapotait egy lineáris vektortér elemeivel jellemezzük.

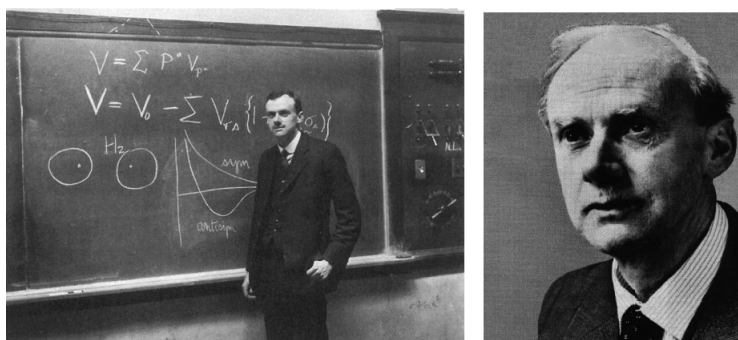
Az elemeket – vagyis az állapotokat – szokás vektornak is nevezni: az eredetileg P. Dirac angol fizikus által bevezetett és manapság teljesen elterjedt jelölésük a $|\rangle$ ketnek nevezett szimbólumban szereplő betű pl. $|\psi\rangle$. A lineáris vektortér alapvető matematikai tulajdonságai alapján, ha egy kvantumrendszerben lehetséges két állapot, akkor általában azok lineáris kombinációja is egy lehetséges állapot:

$$|\psi\rangle = c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle. \quad (17.1)$$

Ez lényegesen különbözik a klasszikus mechanika állapotfogalmától, ahol a részecskéket jellemző általános koordináták és sebességek (vagy impulzusok) együttese jellemzi az állapotot, és ilyen szuperpozíciós törvény nem érvényes. A vektortér lineárisan független elemeinek száma a *dimenzió*. A kvantummechanikában véges vagy megszámlálhatóan végtelen dimenziós terek fordulnak elő. A tér eleme a zéró vektor is, de az nem jellemez fizikai állapotot, ezért ezt egyszerűen 0-val jelöljük.

Egy adott kvantumfizikai problémához egy alkalmasan választott lineáris tér tartozik.

Paul Dirac(1902-1984)



47. ábra.

2. A fizikai állapotok tere egy úgynevezett belső szorzattér, azaz *értelmezve van tetszőleges két vektor belső vagy skaláris szorzata, amely egy komplex szám*. Ezt két ekvivalens módon is fogjuk írni: $(|\psi\rangle, |\varphi\rangle)$ illetve $\langle\psi|\varphi\rangle$ vagyis

$$(|\psi\rangle, |\varphi\rangle) \equiv \langle\psi|\varphi\rangle = c \in \mathbb{C}. \quad (17.2)$$

Ennek a c komplex számnak a neve *valószínűségi amplitúdó*, amely egy sajátosan kvantumfizikai jellegű mennyiség. A fenti c abszolút értékének a négyzete $|\langle\varphi|\psi\rangle|^2 = |c|^2 \geq 0$ adja annak a *valószínűségét*, hogy egy eredetileg $|\psi\rangle$ állapotban lévő rendszer mennyire van ugyanakkor egy másik $|\varphi\rangle$ állapotban. Természetes elvárás, hogy annak a valószínűsége, hogy a $|\psi\rangle$ állapotban lévő rendszer ugyanebben a $|\psi\rangle$ állapotban van, legyen 1, ami a biztos esemény valószínűsége a matematikában. Ezért előírjuk a $|\langle\psi|\psi\rangle|^2 = 1$ tulajdonságot, illetve egy célszerű konvencióval azt, hogy legyen $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Ezt a tulajdonságot, amiről azt mondjuk, hogy $|\psi\rangle$ egyre vagy egységre normált, tehát rendszerint megkívánjuk az elemektől.

A valószínűségi amplitúdó a közönséges belső szorzathoz hasonló tulajdonságokkal rendelkezik, azaz a második tényezőben lineáris:

$$(|\psi\rangle, |\varphi\rangle + |\chi\rangle) = \langle\psi|\varphi\rangle + \langle\psi|\chi\rangle, \quad \langle\psi|a\varphi\rangle = a\langle\psi|\varphi\rangle, \quad (17.3)$$

ahol a egy tetszőleges komplex szám, de a tényezők sorrendjének fölcserélésekor az eredmény a komplex konjugált szám:

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^*, \quad (17.4)$$

ahol $*$ a komplex konjugálást jelenti. Az ilyen típusú komplex értékű belső szorzatot hermitikusnak szokás nevezni C. Hermite francia matematikus nyomán. Ebből következően $\langle\psi|\psi\rangle$ valós, és posztuláljuk, hogy

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0, \text{ és } \langle\psi|\psi\rangle = 0 \text{ akkor és csak akkor, ha } |\psi\rangle = 0. \quad (17.5)$$

Abból, hogy előírjuk, hogy a belső szorzat legyen lineáris a második tényezőben ugyanakkor hermitikus is következik, hogy a belső szorzat konjugált lineáris az első tényezőben: $(a|\psi\rangle, |\varphi\rangle) = a^*(|\psi\rangle, |\varphi\rangle) = a^*\langle\psi|\varphi\rangle$, azaz az első tényezőtől az azt szorzó szám komplex konjugáltja emelendő ki.

Két vektor $|\varphi\rangle$ és $|\psi\rangle$ ortogonális (merőleges), ha $\langle\psi|\varphi\rangle = 0$.

Szokásos a $\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} =: \|\psi\|$ jelölés, és $\|\psi\|$ -t a vektor hosszának vagy normájának nevezzük. Megfelelő állandóval való szorzással mindig el lehet érni, hogy a norma $\|\psi\| = 1$ legyen.

A $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$ elemekről azt mondjuk, hogy ortogonális és normált (röviden ortonormált) rendszert alkotnak, ha egyikük sem a nulla vektor, és

$$\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{ha } i = j \\ 0 & \text{ha } i \neq j \end{cases} \quad (17.6)$$

Ha a tér n dimenziós, akkor az így megadott vektorrendszer egy úgynevezett bázist alkot, azaz lineáris kombinációjukkal bármely vektor előállítható.

Végtelen dimenziós terekben végtelen sok ilyen páronként ortogonális és normált vektor létezik. Végtelen dimenziós teret kell használni, ha pl. egy részecske helyéről akarunk információt megadni a kvantummechanikában, amely rendszerint végtelen sok lehetőséget jelent. Annak ellenére, hogy egy részecske térbeli helyének a valós számokkal megegyező számosságú, azaz kontinuum sok lehetősége van, érdekes módon azt mégis meg lehet adni megszámlálhatóan végtelen számú valószínűségi amplitúdóval.

Egy konkrét probléma esetén, egy állapotokat megadó vektort rendszerint valamilyen alkalmas reprezentációban adunk meg. Ez másképpen azt jelenti, hogy az állapotok terében választunk egy konkrét *ortonormált* bázist, az állapotot kifejtjük a bázisvektorokon, és a kifejtési együtthatók halmazával adjuk meg az állapotot. A $|\psi\rangle$ állapotnak az $|u_k\rangle$ bázison vett kifejtése

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |u_k\rangle, \quad (17.7)$$

ahol egy c_j együtthatót a $c_j = \langle u_j|\psi\rangle$ belső szorzat ad meg. Ez utóbbi a (17.7) egyenlőségből kapható, ha azt szorozzuk az $\langle u_j|$ -vel. A c_k együtthatók eszerint annak amplitúdói, hogy a $|\psi\rangle$

állapotú részecske az u_k állapotban van. Ha $|\psi\rangle$ normált, akkor $\sum_k |c_k|^2 = 1$. Ha a probléma véges (n) dimenziós, akkor a kifejtési együtthatók száma véges. Két vektor belső szorzatát az $|u_k\rangle$ reprezentációban a

$$\langle\psi|\varphi\rangle = (|\psi\rangle, |\varphi\rangle) \equiv \left(\sum_k c_k |u_k\rangle, \sum_j d_j |u_j\rangle\right) = \sum_k c_k^* d_k \quad (17.8)$$

szorzatösszeg adja meg, ahol kihasználtuk a belső szorzat tulajdonságait és az $|u_k\rangle$ bázis ortonormáltságát.

3. A kvantumos részecskék állapotait rendszerint egy berendezéssel vizsgáljuk, ez a bejövő állapotot egy másik állapotba transzformálja. Ezért egy mérőberendezést a kvantummechanikában egy A lineáris transzformációval más néven *lineáris operátorral* írunk le, amely valamely állapothoz egy másik állapotot rendel:

$$|\psi\rangle \rightarrow |\phi\rangle = A|\psi\rangle. \quad (17.9)$$

A linearitás azt jelenti, hogy $A(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1A|\psi_1\rangle + c_2A|\psi_2\rangle$.

Bizonyos bemenő állapotok nem változnak, a kimenet biztosan megjósolható, s lényegében meg-egyezik a bemenő állapottal. Ezeket a berendezés sajátállapotainak nevezzük. A lehetséges kimenetek pedig a bemenő részecske állapotától függetlenül mindig a berendezés sajátállapotainak valamelyike. Ezek ortogonálisak, $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = 0$ ha $i \neq j$, illetve az előző konvenció szerint $\langle\varphi_i|\varphi_i\rangle = 1$, azaz a kimenetek ortonormált bázist alkotnak a (17.6) előírásnak megfelelően.

A kimenetekhez azon kívül, hogy azok újabb állapotok, bizonyos valós számokat rendelünk, ezek a mérési eredmények. Pl. a spin értéke bizonyos irányban, lehet $\hbar/2$ vagy $-\hbar/2$, vagy a mért koordináta értéke lehet valamilyen vonatkoztatási ponttól (origó), valamilyen irányban pl. x tengely mentén mért előjeles távolság, azaz x koordináta.

Most megkonstruáljuk a lineáris operátor matematikai alakját a sajátállapotainak és a megfelelő mérési eredményeink segítségével. Legyenek a berendezés sajátállapotai a $|\varphi_i\rangle$ állapotok, és rendeljük a φ_i kimenethez valamilyen megfontolás alapján az α_i valós számmal megadott mért értéket. Először tekintsük a berendezés egyetlen kimenő csatornáját, amelyik mondjuk a $|\varphi_i\rangle$ sajátállapotnak felel meg, a többit pedig zárjuk le. Ehhez a szituációhoz rendeljük hozzá az $E_i = |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ szimbólumot, amelyet operátornak tekinthetünk, abban az értelemben, hogy egy tetszőleges $|\psi\rangle$ állapothoz az E_i rendelje hozzá az

$$E_i|\psi\rangle = |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle = |\varphi_i\rangle c_i \quad (17.10)$$

vektort, ahol c_i a $\langle\varphi_i|\psi\rangle$ belső szorzatnak megfelelő valószínűségi amplitúdó. A kifordított $\langle\varphi_i|$ tehát itt műveletként viselkedik, a mögötte lévő vektorral vett belső szorzatát kell tekinteni. Ha a $|\psi\rangle$ éppen valamelyik sajátállapottal azaz $|\varphi_j\rangle$ -vel egyezik meg akkor láthatólag

$$E_i|\varphi_j\rangle = |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = |\varphi_i\rangle\delta_{ij}, \quad (17.11)$$

mivel $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$. Ez felel meg annak, hogy ha a bejövő állapot a nyitott csatornának megfelelő sajátállapot, akkor azt a berendezést reprezentáló E_i operátor változatlanul átengedi, a többi csatornának megfelelő *sajátállapotot* viszont nem engedi át, tehát kinullázza. Ha minden csatorna nyitva van, akkor a berendezést az egyes csatornákhöz tartozó E_i operátorok összessége jellemzi. A formalizmust még kiegészítjük azzal, hogy az egyes E_i operátorokat megszorozzuk a hozzájuk tartozó α_i számszerű mérési eredménnyel, s ez lesz a teljes berendezést reprezentáló operátor:

$$A = \sum_i \alpha_i E_i = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|. \quad (17.12)$$

Ez láthatólag egy lineáris operátor, mivel a belső szorzat lineáris, azaz tagonként végrehajtható, és a konstans kiemelhető.

A hatása egy tetszőleges $|\psi\rangle$ -re: $A|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i | \psi \rangle = \sum_i c_i \alpha_i |\varphi_i\rangle$ szerint fejezhető ki az A sajátállapotaival. Az A hatása egy $|\varphi_j\rangle$ sajátállapotra:

$$A|\varphi_j\rangle = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle \delta_{ij} = \alpha_j |\varphi_j\rangle. \quad (17.13)$$

Az itt látható

$$A|\varphi_j\rangle = \alpha_j |\varphi_j\rangle \quad (17.14)$$

egyenlőség a matematikailag szokásos értelemben mutatja, hogy a $|\varphi_j\rangle$ -k az A operátor sajátvektorai, az α_j -k pedig a megfelelő sajátértékek. Érdemes megjegyezni a következőt. A (17.12) által definiált lineáris operátorokon túl az állapotok terén értelmezhetők olyan általánosabb lineáris operátorok is, amelyek nem írhatók a (17.12) alakba, tehát nem reprezentálnak fizikai mennyiségeket. Egy a sok egyéb lehetséges példa mellett, ha a (17.12)-ben az α_i valós számok helyett komplex számokat írunk. Az így kapott operátorok továbbra is lineárisak maradnak, amint arról egyszerűen meggyőződhetünk, de ezeket nem szokás fizikai mennyiségeknek tekinteni. A kvantummechanikában is találkozunk ilyenekkel a későbbiek során. Azokat az operátorokat, amelyeket valamilyen $|\varphi_i\rangle$ ortonormált bázissal és a hozzájuk tartozó α_i valós számokkal a (17.12) alakba lehet írni, önadjungált (néha hermitikus) operátoroknak nevezzük.

A fentiek alapján tehát kimondhatjuk a következő szabályt:

Egy mérőberendezés által mérhető fizikai mennyiséget a kvantummechanikában egy A lineáris transzformációval más néven lineáris operátorral írunk le. A fizikai mennyiségek mért eredményei az azokat reprezentáló operátorok sajátértékei, a mérés után kimenetként jelentkező állapotok pedig a megfelelő sajátvektorok.

Mint látni fogjuk egy szorzattéren értelmezett lineáris operátor általános alakja $B = \sum_{i,j} b_{ij} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_j|$, ahol $|\varphi_i\rangle$ valamilyen ortonormált bázis, a b_{ij} -k komplex számok. Az operátor hatását a $|\psi\rangle$ állapotra a $B|\psi\rangle = \sum_{i,j} b_{ij} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_j | \psi \rangle$ képlettel adjuk meg, amely láthatólag a $|\varphi_i\rangle$ vektorok egy lineáris kombinációja. Rendeljük hozzá a B operátorhoz a $B^\dagger = \sum_{i,j} b_{ij}^* |\varphi_j\rangle \langle \varphi_i|$ operátort, amely szintén lineáris, és amelyet úgy kaptunk, hogy a b_{ij} -k helyett a komplex konjugáltjukat írtuk és a φ_i -t és a φ_j -t megcseréltük. A $B^\dagger$ operátort a B operátor adjungáltjának, vagy hermitikus konjugáltjának nevezzük. Azokat az operátorokat amelyekre $B = B^\dagger$ önadjungált operátoroknak nevezzük.

17.1 Feladat: Milyen föltételt kell teljesítenie a b_{ij} számok mátrixának, hogy a B önadjungált legyen?

17.2 Feladat: Mutassuk meg, hogy egy A önadjungált operátor esetén érvényes a következő tulajdonság:

$$\langle \psi | A | \varphi \rangle = (\langle \psi |, A | \varphi \rangle) = (A | \psi \rangle, | \varphi \rangle) = \langle \varphi | A | \psi \rangle^*$$

Alapvető fontosságú a kvantummechanikában az ún. spektráltétel (lásd lineáris operátorok elmélete), amellyel később fogunk foglalkozni. Eszerint egy A önadjungált operátor sajátvektoraival teljes ortonormált bázis adható meg a Hilbert-téren, azaz A sajátvektorai segítségével bármely vektor kifejezhető.

4. Ha nem végzünk mérést, az állapotok akkor is változnak időben. Vagyis mialatt az idő múlik, az állapot változik: a változást a valós t paraméterhez hozzárendelt $t \rightarrow |\Psi(t)\rangle$ függvény adja, ahol a függvény lehetséges értékei az állapottér vektorai.

A kvantumrendszer időbeli változását egy differenciálegyenlet, a Schrödinger-egyenlet, másnéven dinamikai egyenlet írja le, melynek alakja:

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = H|\Psi(t)\rangle, \quad (17.15)$$

ahol H az energia mérésének megfelelő berendezéshez tartozó operátor, melynek neve történeti okok miatt Hamilton-operátor. A kvantummechanikában a Newton-egyenlet helyére a Schrödinger-egyenlet lép. A Schrödinger-egyenlet fontos tulajdonsága, hogy lineáris, azaz a lehetséges megoldások lineáris kombinációja is megoldás. Miért van több lehetséges megoldás? Azért, mert az

egyenlet – mint minden differenciálegyenlet – általános megoldása ún. integrációs állandókat tartalmaz, mégpedig annyit ahány dimenziós a $|\Psi(t)\rangle$ -t tartalmazó vektortér. Ezeket az integrációs állandókat a kezdeti feltételek határozzák meg, azaz a $|\Psi(t=0)\rangle$ vektor, illetve ennek komponensei valamely bázisban. Két különböző megoldás tehát különböző kezdeti feltételeket jelent, s ezek lineáris kombinációja ismét más kezdeti feltételhez tartozik.

Mivel a dinamikai egyenlet szerint a H Hamilton-operátor kitüntetett szerepet játszik, a H sajátállapotai is kitüntetettek: A

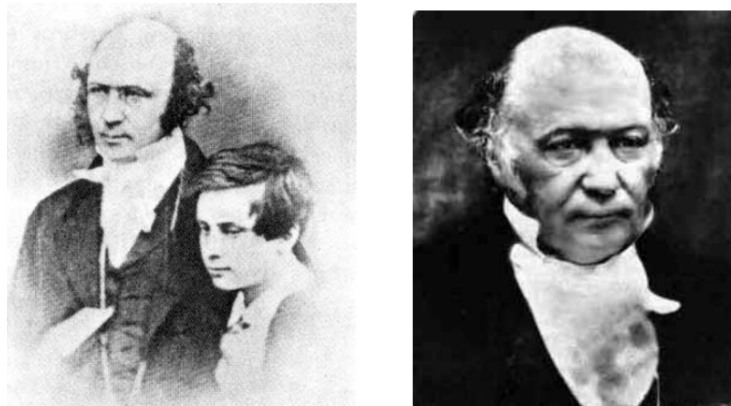
$$H |u_\varepsilon\rangle = \varepsilon |u_\varepsilon\rangle \quad (17.16)$$

energiasajátérték-egyenlet $|u_\varepsilon\rangle$ időfüggetlen megoldásai adják a stacionárius állapotokat, amelyek időfejlődése a legegyszerűbb

$$|u_\varepsilon\rangle e^{-i\varepsilon t/\hbar} \quad (17.17)$$

alakú, amint arról a (17.15) egyenletbe való visszahelyettesítéssel meggyőződhetünk. Ezek azok az állapotok, amelyek létezését Bohr még az "igazi" kvantummechanika megjelenése előtt posztulálta.

William R. Hamilton (1805-1865)



48. ábra.

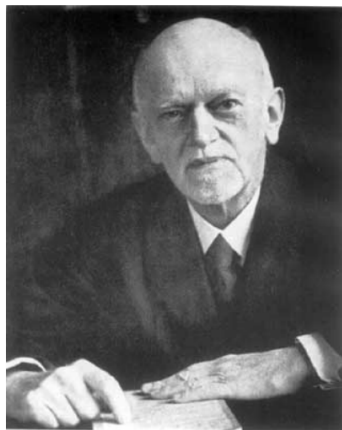
1. TESZTSOROZAT

II. rész

18. Hilbert-tér és lineáris operátorai, Dirac-jelölés

A Kvantumfizika alapjai c. részben láttuk, hogy a mikrorészecskék tulajdonságai magyarázhatók egy matematikai képpel, melyben a részecske állapotváltozásait komplex számokkal, valószínűségi amplitúdókkal írjuk le. Ezeket egy ψ absztrakt állapotból egy másik φ állapotba való átmenethez rendeljük, és $\langle\varphi|\psi\rangle$ -vel jelöljük. Ennek abszolút érték négyzete mondja meg azt, hogy mekkora az átmenet valószínűsége. Ha a ψ állapotú részecskék valamilyen tulajdonságát egy alkalmas berendezéssel mérjük, akkor azt találjuk, hogy a berendezés a részecske állapotát megváltoztatja, és ez általában több különböző lehetséges módon történhet. A berendezés után a részecske állapota valamilyen a berendezésre jellemző u_i állapot lesz, ezek a berendezés sajátállapotai. Az egyes sajátállapotokba $\langle u_i|\psi\rangle$ valószínűségi amplitúdóval azaz $|\langle u_i|\psi\rangle|^2$ valószínűséggel kerülnek a részecskék. Valójában magát a ψ állapotot önmagában nem is tudjuk megadni. A ψ megadása éppen úgy történik, hogy megmondjuk, hogy valamilyen kiválasztott berendezés esetén annak egyes kimenő csatornáiba, amelyek lehetnek diszkrét vagy folytonosak, mekkora amplitúdóval jut a részecske. Az állapotról akkor lehet konkrétan beszélni, tehát éppen azáltal tudjuk jellemezni, hogy megmondjuk, mekkorák ezek az amplitúdók valamilyen kiválasztott mennyiség mérése szempontjából. Megjegyezzük még, hogy mivel egy részecske állapota szükségképpen megváltozik a mérés során, a konkrét méréshez az szükséges, hogy sok azonos módon preparált részecskével végezzünk mérést. Ha a részecskén semmifajta mérést nem végeztünk, vagy nem minden lehetséges amplitúdóját ismerjük, az állapotot akkor is lehet alkalmas módon jellemezni, erről azonban itt egyelőre nem lesz szó.

David Hilbert (1862-1943)



Neumann János (1903-1957)



49. ábra.

Eme tapasztalatok alapján a kvantummechanika kialakulása után rövidesen kiformalódott az a matematikai keret, amely alkalmas a mikrorészecskék tulajdonságainak tárgyalására. Ezt a hátteret, amely a Hilbert-terek lineáris operátorainak elméletén alapul, a matematikai egzaktás minden követelményének megfelelően Neumann János dolgozta ki. Ennek lényege, hogy a részecskék állapotait egy lineáris, belső szorzat struktúrával is ellátott vektortér elemeinek kell tekinteni, a jellemző fizikai mennyiségeknek pedig a téren értelmezett lineáris operátorok felelnek meg. A mondott megfeleltetés pontosabb részleteit a következőkben majd axiómaszerűen is ki fogjuk mondani, előbb azonban bevezetjük az állapottér, azaz a Hilbert-tér fogalmát.

Jelölésünkben Dirac nyomán a vizsgálandó halmaz, a $\mathfrak{H}$ Hilbert-tér elemeit a $|\psi\rangle, |\varphi\rangle, |\phi\rangle, |\chi\rangle$ módon fogjuk jelölni, amelyekre a közönséges háromdimenziós vektorokhoz nagyon hasonló tulajdonságok érvényesek, azaz az elemeket össze lehet adni és komplex számmal szorozni, és ezek ismét

a tér elemei lesznek. Másképpen szólva a tér elemein két művelet definiálható, a kommutatív és asszociatív összeadás és a számmal való szorzás. Azaz $|\psi\rangle + |\varphi\rangle$ és $c|\psi\rangle$ is a tér eleme, ahol c egy komplex szám. A szorzó komplex voltának lehetősége miatt bonyolultabb a vizsgált tér a közönséges vektorok terénél, mindazonáltal $\mathfrak{H}$ elemeit vektoroknak is szokás nevezni. A $|\cdot\rangle$ jelölés a $\mathfrak{H}$ tér elemeire P. Dirac-tól származik, és csak a kvantummechanika fizikai irodalmában használatos, alább látni fogjuk ennek a jelölésnek az indokát és bizonyos előnyeit.

A $\mathfrak{H}$ tetszőleges elemeire érvényes, hogy

I. $|\psi\rangle + |\varphi\rangle = |\varphi\rangle + |\psi\rangle$ kommutatív, $|\psi\rangle + (|\varphi\rangle + |\chi\rangle) = (|\psi\rangle + |\varphi\rangle) + |\chi\rangle$, asszociatív, létezik egyetlen olyan vektor $\emptyset$, amelyre $|\psi\rangle + \emptyset = |\psi\rangle$,

II. $a(|\psi\rangle + |\varphi\rangle) = a|\psi\rangle + a|\varphi\rangle$, $(a+b)|\psi\rangle = a|\psi\rangle + b|\psi\rangle$, $a(b|\psi\rangle) = (ab)|\psi\rangle$, $1|\psi\rangle = |\psi\rangle$, $0|\psi\rangle = \emptyset$.

Az utolsó tulajdonság miatt a 0 szám és a $\emptyset$ vektor között a továbbiakban nem kell különbséget tenni.

Lineáris függetlenség. A $c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle + \dots + c_n|\varphi_n\rangle$ alakú kifejezést a $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$ elemek lineáris kombinációjának nevezzük. A $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$ elemeket lineárisan függetleneknek nevezzük, ha a $c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle + \dots + c_n|\varphi_n\rangle = 0$ összefüggés csak a $c_1 = c_2 = \dots = c_n = 0$ esetben teljesül. Egyébként a vektorok lineárisan összefüggők. A vektortér véges és éppen n dimenziós, ha létezik n számú lineárisan független vektor, de ennél több már nincs. Ha tetszőleges számú lineárisan független elem létezik, akkor a tér végtelen dimenziós.

A kvantummechanikai leírás a lineáris térnél gazdagabb struktúrát követel, ezért definiáljuk a vektorok skaláris vagy belső szorzatát is. Egy rendezett $|\psi\rangle, |\varphi\rangle$ elempárhoz egy komplex számot rendelünk: ezt két ekvivalens módon is fogjuk írni: $(|\psi\rangle, |\varphi\rangle)$ illetve $\langle\psi|\varphi\rangle$ vagyis

$$(|\psi\rangle, |\varphi\rangle) \equiv \langle\psi|\varphi\rangle. \quad (18.1)$$

Ez a közönséges belső szorzattal majdnem azonos tulajdonságokkal rendelkezik. A második tényezőben lineáris:

$$(|\psi\rangle, |\varphi\rangle + |\chi\rangle) = \langle\psi|\varphi\rangle + \langle\psi|\chi\rangle, \quad \langle\psi|a\varphi\rangle = a\langle\psi|\varphi\rangle, \quad (18.2)$$

de a tényezők sorrendjének fölcserélésekor az eredmény a komplex konjugált szám

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^* \quad (18.3)$$

s emiatt

$$\langle a\psi|\varphi\rangle = a^* \langle\psi|\varphi\rangle. \quad (18.4)$$

(18.3)-ból következően $\langle\psi|\psi\rangle$ valós, és posztuláljuk, hogy

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0, \text{ és } \langle\psi|\psi\rangle = 0 \text{ akkor és csak akkor, ha } |\psi\rangle = 0. \quad (18.5)$$

A vektor hossza, vagy normája $|\psi| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$. Az ilyen módon kapott tér egy belső szorzattér, vagy véges dimenziós esetben szokásos a komplex euklideszi tér elnevezés is.

A belső szorzat segítségével értelmezhető két vektor, a ψ és φ távolsága, amelyet $|\psi - \varphi|$ definiál. Értelmezhető az elemek sorozata, illetve a távolság fogalmának fölhasználásával a konvergencia illetve a határpont is. Ha a vektortér véges dimenziós, akkor a valós számokra vonatkozó ismert tételhez hasonlóan meg lehet mutatni, hogy minden Cauchy-sorozat konvergens a térben. Azaz, ha φ_n egy olyan sorozat, hogy $|\varphi_n - \varphi_m|$ tetszőlegesen kicsivé válik valahányszor n és m is elegendően nagy (ezt nevezzük Cauchy-sorozatnak), akkor a sorozat konvergens, vagyis létezik olyan φ elem a térben, hogy $|\varphi_n - \varphi| \rightarrow 0$, azaz $\varphi_n \rightarrow \varphi$. Végtelen dimenziós térben ez nem föltétlenül van így. Ha így van, akkor az a tér egy további, az előzőektől független tulajdonsága, és ekkor a teret *teljesnek* nevezzük. A lineáris belső szorzatteret, amelyben minden Cauchy-sorozat konvergens, tehát ebben az értelemben teljes is, Hilbert-térnek nevezzük. A véges dimenziós euklideszi tér – teljes lévén – automatikusan Hilbert-tér is.

Altérnek nevezzük a tér azon részhalmazait, amelyek maguk is rendelkeznek a fentebb kirótt tulajdonságokkal. Két triviális altér létezik, az egyik a teljes tér, a másik a csak a 0 vektorból álló tér.

Főntebb már Dirac jelölését alkalmaztuk, Dirac matematikus kortársainak eredményeitől függetlenül lényegében maga is megfogalmazta ezeket a tulajdonságokat. A lineáris tér elemeire a belső szorzat főnt használt jelöléséből kiindulva, magukat a vektorokat is ellátta a zárójel felével, azaz a φ vektorra a $|\varphi\rangle$ jelölést vezette be, és ezeket *ket*-nek nevezte. A $\langle\psi|\varphi\rangle$ skaláris szorzatot pedig úgy tekintette, mint egy a ketek halmazán vett komplex értékű lineáris függvényt, funkcionált. Az összes ilyen funkcionál halmaza a ketek terének duálisa, maga is lineáris tér. Ezen tér elemeit Dirac $\langle\psi|$ -vel jelölte és ezeket *bra* vektoroknak nevezte el. A bra és a ket szavak a $\langle | \rangle$ jel angol elnevezésének "bracket" megfelelő részeire utalnak. A bra vektorok a következő tulajdonságúak:

$$\langle a\psi + b\varphi| = a^* \langle\psi| + b^* \langle\varphi|. \quad (18.6)$$

Megjegyezzük, hogy a lineáris tér fogalma logikailag független a belső szorzat létezésétől, ez utóbbi egy további gazdagítása a lineáris tér matematikai struktúrájának. Mivel azonban a természet kvantumos jelenségeinek leírásához ez a gazdagabb struktúra szükséges, a Dirac-féle jelölés már eleve utal a belső szorzat jelenlétére. Ennek a jelölésmódnak, mint alább látni fogjuk, a formalizmus alkalmazásakor jelentős előnyei vannak.

Érvényes a Cauchy-Bunyakovszkij-Schwarz-egyenlőtlenség:

$$|\langle\psi|\varphi\rangle| \leq |\psi| |\varphi|. \quad (18.7)$$

A $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$ elemekről azt mondjuk, hogy ortogonális és normált – röviden *ortonormált* – bázist alkotnak az n dimenziós térben, ha egyikük sem a nulla vektor, és

$$\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{ha } i = j \\ 0 & \text{ha } i \neq j. \end{cases} \quad (18.8)$$

Az így megadott vektorrendszer valóban bázist alkot, azaz elemei lineárisan függetlenek. Tekintsük ugyanis a $c_1 |\varphi_1\rangle + c_2 |\varphi_2\rangle + \dots + c_n |\varphi_n\rangle = 0$ egyenlőséget, és szorozzuk meg azt skalárisan $\langle\varphi_k|$ -val $k = 1, 2, \dots, n$. Az ortonormáltság miatt kapjuk, hogy $c_k \langle\varphi_k|\varphi_k\rangle = 0$ minden k -ra, azaz $c_k = 0$, minden k -ra, ez pedig éppen azt jelenti, hogy a főnti vektorok lineárisan függetlenek. Az algebrából ismert Gram-Schmidt-féle ortogonalizációs eljárással lineárisan független vektorokból, páronként ortogonális vektorrendszer képezhető.

18.1. Lineáris operátorok

Egy mikrorészecskét egy valamilyen fizikai mennyiséget mérő mérőberendezésbe juttatva, a mikrorészecske állapota megváltozik, ez az oka annak, hogy a mérőberendezéseket, illetve az általuk mért fizikai mennyiségeket a kvantummechanikában operátorokkal írjuk le, amelyek a vektorokat egymásba transzformálják.

Egy a $\mathfrak{H}$ -ból sajátmagába képező $|\varphi\rangle \rightarrow A|\varphi\rangle = |\psi\rangle$ transzformációt *lineáris operátornak* nevezünk, ha teljesül a következő két összefüggés:

$$A(|\varphi\rangle + |\chi\rangle) = A|\varphi\rangle + A|\chi\rangle, \quad \text{és} \quad A(c|\varphi\rangle) = cA|\varphi\rangle, \quad (18.9)$$

ahol c komplex szám. A linearitásból következik, hogy a 0 vektorhoz minden lineáris operátor a 0 vektort rendeli hozzá.

Pontosabban a $|\varphi\rangle \rightarrow A|\varphi\rangle = |\psi\rangle$ leképezést, mely $\mathfrak{H}$ valamely D_A részhalmazát (A értelmezési tartományát) $\mathfrak{H}$ egy másik R_A részhalmazára képezi le lineáris operátornak nevezünk, ha minden $\varphi, \chi \in D_A$ elemre teljesülnek a (18.9) összefüggések. Két operátor egyenlő, ha értelmezési tartományuk megegyezik, és minden $|\varphi\rangle$ -re $A|\varphi\rangle = B|\varphi\rangle$.

Megmutatható, hogy véges dimenzióban a lineáris operátorok értelmezési tartománya természetes módon kiterjeszthető a teljes térre, amennyiben nem lennének a $\mathfrak{H}$ tér minden vektorán értelmezve. Végtelen dimenzióban ez csak az úgynevezett korlátos operátorokra igaz. Az A operátort korlátosnak nevezzük, ha létezik olyan pozitív C szám, hogy tetszőleges φ -re $|A\varphi| \leq C |\varphi|$. Egyszerű megmutatni, hogy az A

operátor korlátossága ekvivalens azzal a tulajdonsággal, hogy tetszőleges φ -hez tartó φ_n sorozatra az $A\varphi_n$ sorozat $A\varphi$ -hez tart. Ez utóbbi tulajdonság a folytonosság. Nem nehéz belátni, hogy véges dimenziós térben minden lineáris operátor korlátos, tehát folytonos, így a teljes térben értelmezhető.

A kvantummechanikai problémákhoz tartozó Hilbert-terek általában végtelen dimenziósak és az előforduló fizikai mennyiségek operátorai nem korlátosak. Ezért az alább következő állítások további föltételek és általánosítások nélkül matematikai szigorúsággal csak véges dimenziós esetben érvényesek, de a föltételek alkalmas finomításaival (az értelmezési tartomány megjelölésével, megfelelő kikötések és kiterjesztések segítségével) nagyon sok tekintetben végtelen dimenzióra is átvihetők, ezekről a matematikai irodalom tanulmányozásával tájékozódhatunk.

Operátorok összegét és számmal való szorzatát a következő formulák értelmezik:

$$(A + B) |\varphi\rangle = A |\varphi\rangle + B |\varphi\rangle, \quad (18.10)$$

$$(cA) |\varphi\rangle = cA |\varphi\rangle. \quad (18.11)$$

Az összeadás a linearitásból következően könnyen beláthatóan asszociatív $(A + B) + C = A + (B + C)$ és kommutatív: $A + B = B + A$. A hatását a $|\psi\rangle$ vektorra kétféleképpen is fogjuk írni:

$$A |\psi\rangle \equiv |A\psi\rangle. \quad (18.12)$$

Az I -vel jelölt egységoperátor hatása minden vektorra $I |\psi\rangle = |\psi\rangle$, a 0 operátort pedig a $0 |\psi\rangle = 0$ definiálja.

Két operátor szorzata $AB |\varphi\rangle = A |B\varphi\rangle$. Az összeadás a szorzásra nézve disztributív. Általában $AB |\varphi\rangle$ és $BA |\varphi\rangle$ két különböző vektor, azaz $AB \neq BA$: a két operátor általában *nem fölcserélhető*. Bevezetve az

$$[A, B] := AB - BA \quad (18.13)$$

definícióval két operátor *kommutátorát*, másképpen azt mondhatjuk, hogy két operátor kommutátora általában nem 0.

Inverz operátor: Azt mondjuk, hogy az A operátornak van inverze, ha létezik olyan A^{-1} -el jelölt operátor, amelyre $AA^{-1} = A^{-1}A = I$. Ez az A^{-1} az A operátor inverze, továbbá láthatólag $(A^{-1})^{-1} = A$.

Nem minden operátornak van inverze, de ha van, akkor az egyértelműen meghatározott. Ha úi. A -nak B és C is inverze, akkor $AB = I = AC$ lenne, így $B - C = B(AB - AC) = 0$, azaz $B = C$. Belátható, hogy az inverz létezésének szükséges és elegendő föltétele az, ha bármely $|\psi\rangle$ -hez egy és csak egy olyan $|\varphi\rangle$ vektor van amelyre $A |\psi\rangle = |\varphi\rangle$.

18.2. Reprezentációk, operátorok mátrixa

Legyen $|u_i\rangle$ egy ortonormált bázis a téren. Ekkor egy $|\psi\rangle$ vektor kifejthető a bázis vektorai szerint valamilyen c_i együtthatókkal $|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$. A c_i együtthatók megkaphatók, ha megszorozzuk ezt a kifejtést skalárisan magukkal a bázisvektorokkal. A belső szorzat linearitása és a bázis ortonormáltsága miatt kapjuk, hogy: $\langle u_j | \psi \rangle = \sum_i c_i \langle u_j | u_i \rangle = c_j$. Ily módon a $|\psi\rangle$ kifejtése az alábbi módon is írható

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i | \psi \rangle. \quad (18.14)$$

Az $\langle u_i | \psi \rangle = c_i$ számokat a $|\psi\rangle$ vektor *reprezentációjának* szokás nevezni az $|u_i\rangle$ bázison, és ezeket gyakran egy oszlopba írva adjuk meg a $|\psi\rangle$ vektort. Két vektor skaláris szorzatát $\langle \psi | \varphi \rangle$ -t az $|u_i\rangle$ bázis segítségével a következőképpen számíthatjuk ki. Legyen $|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$ és $|\varphi\rangle = \sum_j b_j |u_j\rangle$, ekkor:

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \left\langle \sum_i c_i u_i \left| \sum_j b_j u_j \right. \right\rangle = \sum_i c_i^* b_i. \quad (18.15)$$

A Dirac-féle beszédmód itt a következő: alkalmazzuk a $|\varphi\rangle$ -re a $\langle \psi | = \sum_i c_i^* \langle u_i |$ bra vektort. A c_i^* sorvektor a $\langle \psi |$ bra reprezentációja az $|u_i\rangle$ bázisban. A c_i és b_i kifejtési együtthatók egyenként

függenek attól, hogy mi az a bázis amelyet használunk, de maga a $\sum_i c_i^* b_i$ skalárszorzat ettől független. Egyszerű megmutatni, hogy egy másik bázisban kiszámítva a belső szorzatot az eredmény ugyanaz a szám.

Tekintsük most az előbb látott $|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i|\psi\rangle$ (18.14) összefüggést. Ezt úgy is fölfoghatjuk, hogy ha a $\sum_i |u_i\rangle \langle u_i|$ -vel skalárisan megszorozzuk a $|\psi\rangle$ -t, akkor $|\psi\rangle$ -t önmagát kapjuk vissza, azaz ez az összeg úgy viselkedik mint az egységoperátor:

$$\sum_i |u_i\rangle \langle u_i| = I. \quad (18.16)$$

Most megmutatjuk, hogy egy ilyen típusú írásmód tetszőleges lineáris operátorra átvihető. Tekintsünk egy A lineáris operátort. Ez egyértelműen meg van határozva, ha egy $|u_i\rangle$ ortonormált bázison megadjuk a hatását. Ugyanis $A|u_i\rangle = |\phi_i\rangle$ minden i -re maga is egy-egy vektor a térben, tehát maga is kifejezhető az $|u_i\rangle$ bázison:

$$A|u_i\rangle = |\phi_i\rangle = \sum_k a_{ki} |u_k\rangle \quad (18.17)$$

valamilyen a_{ki} komplex számokkal, s így egy tetszőleges

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i|\psi\rangle \quad (18.18)$$

vektorra:

$$A|\psi\rangle = \sum_i A|u_i\rangle \langle u_i|\psi\rangle = \sum_{i,k} a_{ki} |u_k\rangle \langle u_i|\psi\rangle. \quad (18.19)$$

Ezt az eredményt Dirac nyomán úgy szokás írni, hogy

$$A = \sum_{i,k} a_{ki} |u_k\rangle \langle u_i|. \quad (18.20)$$

Az $|u_k\rangle \langle u_i|$ mennyiségeket, amelyek a fentiek szerint maguk is lineáris operátorok a bázisvektorok *külső szorzatának* (diádjának) is szokás nevezni. Látható tehát, hogy egy belső szorzat struktúrával is rendelkező térben minden lineáris operátor egy ortonormált bázis vektoraiból alkotott összes lehetséges diád valamilyen lineáris kombinációjaként írható föl. (A lineáris operátor fogalmához egyébként általában nincs szükség a belső szorzatra, viszont az utóbbi hiányában a (18.20) alak nem is értelmezhető.) Az a_{ki} számokat az A operátor *mátrixelemeinek* nevezzük az $|u_i\rangle$ ortonormált bázisban, és ezeket explicit módon meghatározhatjuk az $A|u_i\rangle = \sum_k a_{ki} |u_k\rangle$ (18.17) összefüggés alapján. Az utóbbit skalárisan szorozva $\langle u_j|$ -vel és a bázis ortonormáltóságát fölhasználva ugyanis azt kapjuk, hogy $a_{ji} = \langle u_j|Au_i\rangle \equiv \langle u_j|A|u_i\rangle$, azaz a (18.20)-ban szereplő mátrixelemek közvetlenül kiszámíthatóak az

$$a_{ki} = \langle u_k|Au_i\rangle \equiv \langle u_k|A|u_i\rangle \quad (18.21)$$

összefüggéssel. Az a_{ki} mátrixot, amely nyilvánvalóan függ a választott ortonormált bázistól szokás az A operátor *reprezentációjának* is nevezni az $|u_i\rangle$ bázisban. A fentiek alapján a $|\varphi\rangle = A|\psi\rangle$ transzformáció a $|\varphi\rangle = \sum_k b_k |u_k\rangle$ kifejtést felhasználva, a $\sum_k b_k |u_k\rangle = \sum_{i,k} a_{ki} |u_k\rangle \langle u_i|\psi\rangle = \sum_{i,k} a_{ki} |u_k\rangle c_i$ egyenlőség alapján az $|u_k\rangle$ reprezentációban $b_k = \sum_i a_{ki} c_i$ alakú. Azaz az $|u_k\rangle$ reprezentációban:

$$|\varphi\rangle = A|\psi\rangle \Rightarrow b_k = \sum_i a_{ki} c_i. \quad (18.22)$$

18.1 Feladat: Bizonyítsuk be a következő állításokat:

- (a) Operátorok összegének mátrixa a megfelelő mátrixok összege.
 - (b) Egy számmal szorított operátor mátrixa az operátor mátrixának számszorosa.
 - (c) Két operátor szorzatának mátrixa a megfelelő mátrixok szorzatával egyezik meg.
-

Adjungált operátor: A belső szorzat struktúra lehetővé teszi, hogy minden A lineáris operátorhoz hozzárendeljünk egy másik $A^\dagger$ operátort a következőképpen. Írjuk elő, hogy tetszőleges $|\varphi\rangle$ és $|\psi\rangle$ esetén álljon fenn a

$$\langle\varphi|A\psi\rangle = \langle A^\dagger\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|A^\dagger\varphi\rangle^* \quad (18.23)$$

összefüggés. Az $A^\dagger$ operátort A adjungáltjának nevezzük. A (18.23) követelmény az $A^\dagger$ operátort egyértelműen meghatározza. Legyen az A operátor mátrixa az u_i bázisban $\langle u_k|Au_i\rangle = a_{ki}$, és számítsuk ki $A^\dagger$ mátrixát a (18.23) összefüggés alapján:

$$\langle u_k|A^\dagger u_i\rangle = \langle u_i|Au_k\rangle^* = a_{ik}^*, \quad (18.24)$$

tehát az A mátrixából az $A^\dagger$ mátrixa is kiszámítható, és pedig ha A mátrixa egy bázisban a_{ki} akkor az $A^\dagger$ adjungált operátor mátrixa ugyanebben a bázisban a_{ik}^* , amelynek elemei láthatólag az A mátrix transzponáltjának komplex konjugáltjaként kaphatók meg. A mátrixelemek viszont meghatározzák $A^\dagger$ hatását azon az ortonormált bázison, amelyben a mátrixot megadtuk. A linearitás miatt így $A^\dagger$ minden vektoron meg van határozva, és alakja a (18.20) és (18.21) alapján a Dirac-féle jelölés szerint $A^\dagger = \sum_{i,k} a_{ik}^* |u_k\rangle\langle u_i|$, illetve az összegzési indexeket megcserélve:

$$A^\dagger = \sum_{i,k} a_{ki}^* |u_i\rangle\langle u_k|. \quad (18.25)$$

Vagyis az ilyen alakban felírt operátor adjungáltját úgy kapjuk, hogy a mátrixelemeket komplex konjugáljuk és a ket és bra vektorokat megcseréljük. Egyszerű megmutatni, hogy operátorok összegének adjungáltja az adjungáltak összege: $(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$. Számszorosnál pedig a komplex konjugálttal kell szorozni: $(cA)^\dagger = c^* A^\dagger$, továbbá

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger. \quad (18.26)$$

Azokat az operátorokat, amelyekre $A = A^\dagger$, *önadjungált*, másnéven hermitikus operátornak szokás nevezni (C. Hermite francia matematikus után). Az önadjungált operátorok mátrixának transzponáltja megegyezik a komplex konjugáltjukkal, és így a diagonálisban valós számok állnak.

18.3. Bázisváltás, más kifejtési együtthatók

Egy $|\psi\rangle$ vektort természetesen több különböző bázisban is megadhatunk. A kvantummechanika szóhasználatában ezt úgy mondjuk, hogy egy másik *reprezentációt* használunk. Egy reprezentációt tehát egy adott ortonormált bázis rögzít. Kérdés, mi a kapcsolat egy vektor kétfajta reprezentációja között? Ennek megvilágítása céljából bevezetjük az unitér operátor fogalmát:

Definíció: Unitérnek nevezzük az operátort, ha

$$U^\dagger U = U U^\dagger = I. \quad (18.27)$$

Az unitér operátorok megőrzik a skaláris szorzatot, tetszőleges $|\psi\rangle$, $|\varphi\rangle$ esetén $(U|\varphi\rangle, U|\psi\rangle) = \langle U\varphi|U\psi\rangle = \langle\varphi|U^\dagger U\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle$.

Legyen adva két ortonormált bázis $|\phi_i\rangle$, és $|\chi_k\rangle$. Legyen $|\psi\rangle$ kifejtése $|\psi\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle = \sum_k b_k |\chi_k\rangle$, illetve a másik bázisban $|\psi\rangle = \sum_k b_k |\chi_k\rangle$. Mivel $|\chi_k\rangle$ -k maguk is a tér elemei, kifejtethetők a $|\phi_i\rangle$ bázis segítségével is:

$$|\chi_k\rangle = \sum_i u_{ik} |\phi_i\rangle. \quad (18.28)$$

Ekkor $|\psi\rangle = \sum_k b_k |\chi_k\rangle = \sum_i \sum_k u_{ik} b_k |\phi_i\rangle$. Ezt szorozva $\langle\phi_j|$ -vel, vagy arra hivatkozva, hogy a kifejtési együtthatók egyértelműek $c_j = \sum_k u_{jk} b_k$. A (18.28) alapján $u_{jk} = \langle\phi_j|\chi_k\rangle$. Ezeket a mennyiségeket úgy tekinthetjük, mint az

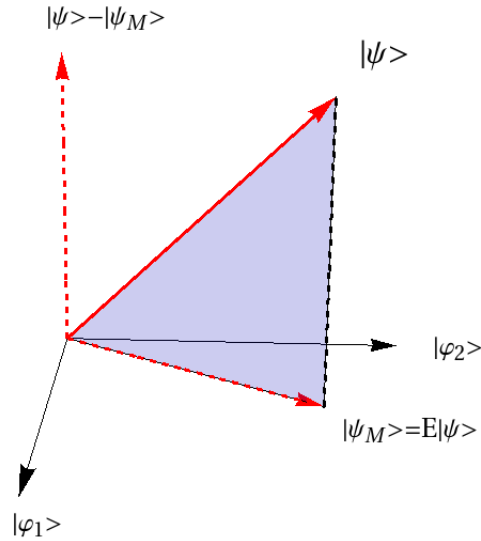
$$U = \sum_i |\chi_i\rangle\langle\phi_i| \quad (18.29)$$

operátor mátrixelemeit akár a $|\chi_k\rangle$ akár a $|\phi_k\rangle$ bázisban. Mivel $U^\dagger = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\chi_i|$, egyszerűen látható, hogy U unitér, azaz $U^\dagger U = U U^\dagger = I$. Megmutattuk tehát, hogy ortonormált bázis elemeit egyenként egy másik ortonormált bázis elemeibe transzformáló operátor unitér.

18.2 Feladat: Mutassuk meg a fenti állítás megfordítását: minden a (18.27) tulajdonsággal rendelkező, unitér operátor ortonormált bázist ortonormált bázisba transzformál.

18.4. Projekciós operátor

Legyen $\mathfrak{M}$ altér a $\mathfrak{H}$ Hilbert-térben. Azoknak a vektoroknak a halmazát, amelyek minden $\mathfrak{M}$ -beli vektorra ortogonálisak az $\mathfrak{M}$ ortogonális komplementerének nevezzük és $\mathfrak{M}^\perp$ -el jelöljük. Egyszerűen látható, hogy $\mathfrak{M}^\perp$ is altér, azaz két $\mathfrak{M}^\perp$ -beli vektor összege és két $\mathfrak{M}^\perp$ -beli vektor számszorosa is merőleges $\mathfrak{M}$ -re. Legyen $|\varphi_i\rangle$ ($i = 1, 2, \dots$) bázis az $\mathfrak{M}$ altérben. Tekintsünk egy $|\psi\rangle$ vektort $\mathfrak{H}$ -ban és a $|\psi_M\rangle = \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle$ vektort, amely nyilvánvalóan $\mathfrak{M}$ -ben van. Ezt a $|\psi_M\rangle$ -et a $|\psi\rangle$ merőleges vetületének nevezzük az $\mathfrak{M}$ altérre (lásd 50. ábra). Tekintsük most a $|\psi_{M^\perp}\rangle = |\psi\rangle - |\psi_M\rangle = |\psi\rangle - \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle$ vektort. Ezt megszorozva skalárisan bármely $\langle\varphi_k|$ -val 0-t kapunk. Ezért ugyancsak 0-t kapunk, ha $\langle\varphi_k|$ bármely lineáris kombinációjával szorzunk, ami azt jelenti, hogy $|\psi_{M^\perp}\rangle$ ortogonális $\mathfrak{M}$ -re, azaz $\mathfrak{M}^\perp$ -ben van.



50. ábra. $|\psi\rangle$ merőleges vetülete az $|\varphi_1\rangle$ és $|\varphi_2\rangle$ által kifeszített altérre

Másképpen tehát $|\psi\rangle = |\psi_{M^\perp}\rangle + |\psi_M\rangle$, azaz a $|\psi\rangle$ -t fölbontottuk, az $\mathfrak{M}$ -be és ortogonális komplementerébe tartozó elemekre. Ez a fölbontás egyértelmű. Ha ugyanis $|\psi\rangle = |\psi_{M^\perp}\rangle + |\psi_M\rangle = |\psi'_{M^\perp}\rangle + |\psi'_M\rangle$ lenne, akkor átrendezés után a $|\psi_M\rangle - |\psi'_M\rangle = |\psi'_{M^\perp}\rangle - |\psi_{M^\perp}\rangle = |\psi_0\rangle$ mind $\mathfrak{M}$ -ben, mind a rá ortogonális $\mathfrak{M}'$ -ben benne van, tehát $\langle\psi_0|\psi_0\rangle = 0$, azaz $|\psi_0\rangle$ a zéró vektor, amiből következik, hogy a fölbontás egyértelmű. A

$$\psi_M = \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle \quad (18.30)$$

összefüggést Dirac nyomán úgy tekinthetjük, mint az

$$E_M = \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \quad (18.31)$$

operátor hatását a $|\psi\rangle$ vektorra, amely az $E_M |\psi\rangle = |\psi_M\rangle$ összefüggés alapján előállítja a vetületet. Ezért az E_M operátort *projekciós operátornak* nevezzük. Ez láthatólag önadjungált és egyszerűen megmutathatóan idempotens, azaz $(E_M)^2 = E_M$. Ha $\mathfrak{M} = \mathfrak{H}$ a teljes tér, akkor a megfelelő $E_{\mathfrak{H}} = I$ (18.16)-nak megfelelően az egységoperátor. Ha viszont az összegben csak egy tag van, akkor az $E_{\varphi} = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ a $|\varphi\rangle$ vektor által generált egydimenziós altérre vetítő projekciós operátor. A fordított állítás is megmutatható, azaz igazolható, hogy minden önadjungált és idempotens operátor projekció.

19. Önadjungált operátorok spektrális előállítás

Egy kvantumos kísérlet, mint pl. az ezüstatomokkal végzett Stern-Gerlach-kísérlet során, az egyes mérési eredmények azt mutatják, hogy a bejövő állapot átalakul egy másik állapottá. Ez utóbbi a mérőberendezésre jellemző valamilyen állapot, amelyet korábban sajátállapotnak neveztünk. Egy részecskén végzett kísérlet során az állapot mindig valamilyik sajátállapotba megy át, de hogy melyikbe azt nem tudjuk. Egy mérés eredménye tehát $|\psi\rangle \rightarrow |u_i\rangle$, amit az $|u_i\rangle\langle u_i|$ projekció $|\psi\rangle \rightarrow |u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle$ hatásával írhatunk le, amely együtthatóként magában foglalja annak az $\langle u_i|\psi\rangle$ amplitúdóját is, hogy éppen az $|u_i\rangle$ állapotba jut a részecske.

A berendezésben azonban benne van az összes lehetséges kimenet lehetősége, ezért a berendezést az összes lehetséges kimenethez tartozó projektorok $|u_i\rangle\langle u_i|$ halmazával célszerű jellemezni. Ezen kívül az egyes kimenetekhez tartozóan valamilyen fizikai mennyiség értéke más és más, pl. a spin z komponense, vagy a spin x komponense, vagy egy részecske koordinátája stb. A berendezést jellemző matematikai objektumba ezt is belefoglaljuk úgy, hogy a megfelelő projektort megszorozzuk a mért fizikai mennyiség adott kimenetéhez tartozó megfelelő α_i sajátértékkel és az egész apparátust egy

$$A = \sum_i \alpha_i |u_i\rangle\langle u_i| \quad (19.1)$$

operátorral írjuk le, amelyben az összeg az összes lehetséges kimenetet tartalmazza. A diszkrét összeg azt jelzi, hogy itt most diszkrét kimenetelekről lehet szó, mint a spin esetében, de később tárgyalni fogjuk azt az esetet is amikor az eredmények folytonosak.

Ha a bejövő részecske éppen valamilyik sajátállapotban van, ami azt jelenti, hogy azt már egy *azonos* berendezéssel preparáltuk, akkor A hatása erre az állapotra saját maga egy számszorosa. Valóban, ha a bejövő részecske állapota $|u_k\rangle$ akkor

$$A |u_k\rangle = \sum_i \alpha_i |u_i\rangle\langle u_i|u_k\rangle = \alpha_k |u_k\rangle, \quad (19.2)$$

azaz

$$A |u_k\rangle = \alpha_k |u_k\rangle \quad (19.3)$$

az eredmény. Ebben a bázisban egyszerűen láthatóan az A operátor mátrixa diagonális, és ha a mért α_i értékek valósak, akkor (18.25) és (18.20) alapján látható, hogy az operátor önadjungált.

Általában azonban közvetlenül nem tudjuk, hogy melyik a sajátállapotok bázisa, mert az operátor nem a fönti alakban, hanem rendszerint egy másik bázisban van megadva. Alapvető feladat tehát, hogy megkeressük azokat az állapotokat, amelyek egy önadjungált operátor sajátállapotai, és megadjuk azt is, hogy mik a megfelelő sajátértékek. Ha ezt tudjuk, akkor meg tudjuk mondani, hogy mekkorák lesznek egy tetszőleges bejövő állapothoz tartozó kimenő amplitúdók, és ezekhez milyen számszerű eredmények tartoznak. Az utóbbiak lesznek a megfelelő sajátértékek. Pl. egy z irányú Stern-Gerlachból kijövő $+z$ állapotú részecskét egy x irányúba, vagy egy tetszőleges irányúba engedve milyen amplitúdókkal kerül az a második berendezés egyes sajátállapotaiba. (Az egyik

leggyakoribb kvantummechanikai feladat, amit később sok speciális esetre fogunk tárgyalni az az, hogy energiamérés után milyen amplitúdóval kerül egy részecske a tér egy adott helyére.)

Az alábbiakban be fogjuk bizonyítani, hogy *n* dimenziós térben minden önadjungált operátornak létezik *n* db páronként ortogonális sajátvektora, azaz létezik olyan ortogonális bázis, amelyet az adott önadjungált operátor sajátvektorai alkotnak. A tétel alkalmas általánosításokkal kiterjeszthető a végtelen dimenziós tér önadjungált operátoraira is.

Invariáns alterek: A $\mathfrak{H}$ tér $\mathfrak{H}_1$ alterét az A operátor invariáns alterének nevezzük, ha bármely $|\psi\rangle \in \mathfrak{H}_1$ esetén $A|\psi\rangle$ is $\mathfrak{H}_1$ -ben van, azaz A nem visz ki $\mathfrak{H}_1$ -ből.

Legyen $\mathfrak{H}_1$ egy egydimenziós altér, amelyet a $|\varphi\rangle$ vektor generál, azaz az összes $c|\varphi\rangle$ alakú vektorok altere, ahol c végigfut az összes komplex számon. Az A operátor linearitása miatt világos, hogy ahhoz, hogy a $\mathfrak{H}_1$ invariáns legyen szükséges és elegendő, hogy $A|\varphi\rangle$ is $\mathfrak{H}_1$ -ben legyen, azaz $A|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$ valamilyen λ , általában komplex számmal.

Sajátvektorok: Azt a nem zéró $|\varphi\rangle \neq \emptyset$ vektort, amelyre $A|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$, az A operátor sajátvektorának, a λ számot pedig A sajátértékének nevezzük. Így ha $|\varphi\rangle$ sajátvektor, akkor a $c|\varphi\rangle$ vektorok egydimenziós invariáns alteret alkotnak.

Tétel: Véges dimenziós térben minden A lineáris (nem föltétlenül önadjungált) operátornak van legalább egy sajátvektora.

Bizonyítás: Vegyünk föl a térben egy tetszőleges $|v_i\rangle$ ortonormált bázist, és tekintsük a keresett $|\varphi\rangle$ vektor kifejtését ebben a bázisban: $|\varphi\rangle = \sum_i c_i |v_i\rangle$, ahol $c_i = \langle v_i | \varphi \rangle$. Ahhoz, hogy $|\varphi\rangle$ sajátvektor legyen, fönn kell állnia az $A|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$ összefüggésnek. Szorozzuk a kifejtést skalárisan balról $\langle v_j |$ -vel

$$\langle v_j | A | \varphi \rangle = \sum_i \langle v_j | A | v_i \rangle c_i = \langle v_j | \lambda | \varphi \rangle = \lambda c_j, \quad (19.4)$$

$$\text{azaz} \quad \sum_i (a_{ji} - \lambda \delta_{ji}) c_j = 0. \quad (19.5)$$

Annak szükséges és elegendő föltétele, hogy a fönti homogén és lineáris egyenletrendszernek az ismeretlen c_j számokra nemtriviális (nem csupa 0) megoldása legyen, az, hogy az egyenlet mátrixának determinánsa tűnjön el:

$$\det |a_{ji} - \lambda \delta_{ji}| = 0. \quad (19.6)$$

A determináns a λ -ban egy n -ed fokú polinom lesz, amelynek mindig van legalább egy gyöke a komplex számok körében. Megkeresve ezt a λ_0 gyököt, majd megoldva az egyenletet a λ_0 -nak megfelelő c_i^0 számokra megkapjuk a $|\varphi\rangle$ sajátvektort mint a $|v_i\rangle$ bázisvektorok lineáris kombinációját. Itt nem használtuk ki, hogy A önadjungált. A fönti (19.5) egyenlet neve *karakterisztikus* vagy *szekuláris egyenlet*.

Most rátérünk az önadjungált operátorokra.

Tétel: Önadjungált operátor sajátértékei valósak.

Bizonyítás:

$$\begin{aligned} A|\varphi\rangle &= \lambda|\varphi\rangle, & \lambda\langle\varphi|\varphi\rangle &= \langle\varphi|A\varphi\rangle = \langle A\varphi|\varphi\rangle = \lambda^*\langle\varphi|\varphi\rangle \\ &\Rightarrow (\lambda - \lambda^*)\langle\varphi|\varphi\rangle = 0 \Rightarrow \lambda = \lambda^*, & \text{mert } \langle\varphi|\varphi\rangle &\neq 0. \end{aligned}$$

Tétel: Önadjungált operátor különböző sajátértékeihez tartozó sajátvektorok ortogonálisak.

Bizonyítás:

$$\begin{aligned} A|\varphi_1\rangle &= \lambda_1|\varphi_1\rangle, & A|\varphi_2\rangle &= \lambda_2|\varphi_2\rangle, & \lambda_1 &\neq \lambda_2 & \text{valósak} \\ \lambda_1\langle\varphi_2|\varphi_1\rangle &= \langle\varphi_2|A\varphi_1\rangle = \langle A\varphi_2|\varphi_1\rangle = \lambda_2\langle\varphi_2|\varphi_1\rangle \\ &\Rightarrow (\lambda_1 - \lambda_2)\langle\varphi_2|\varphi_1\rangle = 0 \Rightarrow \langle\varphi_2|\varphi_1\rangle = 0. \end{aligned}$$

Spektráltétel: n dimenziós térben egy önadjungált operátornak van n darab egymásra páronként merőleges sajátvektora.

Egy adott sajátértékhez tartozó sajátvektorok a zéró vektort hozzávéve alteret alkotnak. Ez az alter invariáns altere az A operátornak, azaz nem visz ki belőle. A spektráltétel bizonyításánál azt használjuk ki, hogy önadjungált operátor esetén egy adott sajátvektorra merőleges ortogonális vektorok halmaza is invariáns alter.

Bizonyítás: Az előzőek szerint mindig van legalább egy sajátvektor $|u_1\rangle$: legyen $A|u_1\rangle = \alpha_1|u_1\rangle$. Az $|u_1\rangle$ -re merőleges vektorok egy $n - 1$ dimenziós $\mathfrak{H}_1$ alteret alkotnak. Megmutatjuk, hogy $\mathfrak{H}_1$ invariáns altere A -nak. Legyen $|\psi\rangle \in \mathfrak{H}_1$, azaz $\langle\psi|u_1\rangle = 0$, akkor $\langle A\psi|u_1\rangle = \langle\psi|Au_1\rangle = \alpha_1\langle\psi|u_1\rangle = 0$, tehát $A|\psi\rangle$ is merőleges $|u_1\rangle$ -re, azaz benne van $\mathfrak{H}_1$ -ben, tehát $\mathfrak{H}_1$ invariáns altere A -nak. Tekinthetjük emiatt A -t a $\mathfrak{H}_1$ -ben. Itt ismét létezik legalább egy sajátvektor $|u_2\rangle$. Tekintsük most $\mathfrak{H}_1$ azon $\mathfrak{H}_2$ alterét amely az u_2 -re merőleges vektorokból áll. Mivel ez $\mathfrak{H}_1$ altere az itteni vektorok $|u_1\rangle$ -re is merőlegesek lesznek. A fönti gondolatmenetet ismételve kapunk egy $|u_3\rangle$ sajátvektort, stb. Az eljárást folytatva végül szükségképpen kapunk egy $|u_n\rangle$ sajátvektort, amely az összes előzőre merőleges. Ilyen módon páronként ortogonális $|u_i\rangle$ vektorok halmazát kapjuk. Mivel egy sajátvektor számszorosa ugyanahhoz a sajátértékhez tartozó sajátvektor, az $|u_i\rangle$ -k normálhatók is $\square$.

Az A önadjungált operátor mátrixa ebben az $|u_i\rangle$ bázisban az

$$a_{ik} = \langle u_i | Au_k \rangle = \alpha_k \langle u_i | u_k \rangle = \alpha_k \delta_{ik} \quad (19.7)$$

összefüggés miatt diagonális, tehát csak a főátlóban vannak nem nulla elemek, és ezek éppen a sajátértékek. Ennek megfelelően a (19.7) összefüggés alapján az A operátor alakja a következő:

$$A = \sum_k \alpha_k |u_k\rangle\langle u_k| = \sum_k \alpha_k E_k, \quad (19.8)$$

ahol $E_k = |u_k\rangle\langle u_k|$ az $|u_k\rangle$ sajátvektorra vetítő projekció. Ezt a formulát az A spektrális fölbontásának nevezzük, a sajátértékek összességét pedig az A önadjungált operátor *spektrumának*, amely szükségképpen valós számokból áll.

Előfordulhat, hogy több különböző ortogonális sajátvektor ugyanahhoz a sajátértékhez tartozik. Ha az adott α_k sajátértékhez tartozó különböző ortogonális vektorok száma $g_k > 1$, akkor azt mondjuk, hogy a sajátérték g_k -szoros, vagy g_k -szorosan *elfajult* vagy *degenerált*. Világos, hogy egy adott α_k -hoz tartozó ortogonális vektorok minden lineáris kombinációja is ugyanehhez a sajátértékhez tartozó sajátvektor, ezek tehát egy g_k dimenziós alteret alkotnak, amelyen belül bármely ortogonális bázis az A sajátvektorainak részhalmaza. Emiatt ha A sajátértékei között van többszörösen degenerált, akkor az egymásra ortogonális sajátvektorok halmaza nem egyértelmű.

Sajátrepresentációban, azaz abban a bázisban, amely az önadjungált operátor sajátvektoraiból áll, az operátor mátrixa diagonális és az átlóban éppen a sajátértékek állnak. A sajátrepresentációban fölírt karakterisztikus polinomból látszik, hogy az α_k sajátérték a karakterisztikus polinom g_k -szoros gyöke.

19.1 Feladat: Bizonyítsuk be, hogy egy A lineáris operátor képe (az operátor értékkészlete) és magja (azok a vektorok, amelyeket az A a nullába képez) alterek a $\mathfrak{H}$ -ban, méghozzá az A invariáns alterei.

19.2 Feladat: Mutassuk meg, hogy egy n dimenziós térben a magtér és a képtér dimenziószámának összege kiadja az egész tér dimenziószámát.

19.3 Feladat: Mutassuk meg, hogy egy projekciós operátor sajátértéke csak 0 vagy 1 lehet.

19.4 Feladat: Pozitívnak nevezünk egy A önadjungált operátort, ha tetszőleges $|\varphi\rangle$ -re $\langle\varphi|A|\varphi\rangle \geq 0$. Pozitív definit az operátor, ha $|\varphi\rangle \neq 0$ -ra $\langle\varphi|A|\varphi\rangle > 0$.

Mutassuk meg, hogy $A^\dagger A$ tetszőleges lineáris A esetén pozitív önadjungált operátor.

19.5 Feladat: Mutassuk meg, hogy unitér operátorok sajátértékei egységnyi abszolút értékű komplex számok.

19.6 Feladat: Mutassuk meg, hogy véges dimenziós térben minden unitér operátor diagonalizálható,

azaz létezik a tér dimenziószámával megegyező számú páronként ortogonális egységvektora.

20. Fölcserélhető operátorok, CSCO

20.1. Fölcserélhető operátorok sajátvektorairól

Mint korábban is jeleztük, két operátor általában nem fölcserélhető, azaz $AB \neq BA$. Ha viszont két operátor fölcserélhető, akkor érvényes a következő igen fontos tétel: *Ha A és B fölcserélhető önadjungált lineáris operátorok, akkor van olyan ortonormált bázis, amely mindkét operátor sajátvektoraiból áll, azaz van közös sajátvektorrendszerük, így egyszerre diagonalizálhatók.*

Bizonyítás: Legyen $|\varphi\rangle$ az A sajátvektora α_1 sajátértékkel: $A|\varphi\rangle = \alpha_1|\varphi\rangle$. Ekkor

$$AB|\varphi\rangle = BA|\varphi\rangle = B\alpha_1|\varphi\rangle = \alpha_1B|\varphi\rangle. \quad (20.1)$$

Azaz $B|\varphi\rangle$ is az α_1 sajátértékhez tartozik.

(i) Ha α_1 nem degenerált, azaz a hozzátartozó invariáns altér egydimenziós, akkor a két – ugyanehhez az α_1 -hez tartozó – sajátvektor $|\varphi\rangle$ és $B|\varphi\rangle$ csak egy konstansszorosban különbözhet egymástól:

$$B|\varphi\rangle = \beta_1|\varphi\rangle, \quad (20.2)$$

ami azt jelenti, hogy $|\varphi\rangle$ a B -nek is sajátvektora. Legyen ebben az esetben $|u_1\rangle := |\varphi\rangle$.

(ii) Ha α_1 degenerált, akkor annyit mondhatunk, hogy minden az α_1 -hez tartozó $|\varphi\rangle$ -vel együtt $B|\varphi\rangle$ is benne van A -nak az α_1 -hez tartozó invariáns alterében, azaz B nem visz ki ebből az alterből, más szóval ez az altér B -nek is invariáns altere. Emiatt megszoríthatjuk B -t erre az alterre, és lévén B önadjungált, létezik olyan egymásra páronként ortogonális vektorrendszer, amelyek B -nek sajátvektorai ebben az alterben. Mivel minden ittlévő vektor A -nak is sajátvektora α_1 sajátértékkel, a kapott vektorok A és B közös sajátvektorai.

Ha most az előbb jelzett egy vagy többdimenziós alterre ortogonális kiegészítő teret vesszük, az ismét invariáns altere lesz A -nak és B -nek, ez következik A és B önadjungált voltából, ahogyan azt a spektráltételnél használt érvelésből láttuk. Ebben az alterben megismételjük az előző megfontolást, és azt addig folytatjuk, amíg a véges dimenziósnak tekintett teljes térben az ortogonális kiegészítő terek el nem fogynak. Az eljárást kezdetjük fordítva is, először B nemdegenerált vagy degenerált sajátértékeivel, akkor általában más egymást követő egyre kisebb dimenziós altérrendszert kapunk, de a tétel természetesen érvényes. Hozzáteesszük, hogy a tétel általánosítható végtelen dimenziós terekre illetve nemkorlátos operátorokra is, de a föltételeket finomítani kell, és a bizonyítás sokkal bonyolultabb.

Fölhívjuk a figyelmet arra, hogy a tétel azt mondja, hogy $[A, B] = 0$ esetén *létezik* közös sajátvektorrendszer, de nincs szó arról, hogy az egyik operátor valamely sajátvektora automatikusan a másik operátor sajátvektora is lenne. Pl. az I egységoperátornak minden nem zéró vektor nyilvánvalóan a sajátvektora 1 sajátértékkel. Ugyanakkor az is világos, hogy I minden más lineáris operátorral fölcserélhető. Ebből azonban nem következik, hogy tetszőleges operátornak is minden nem zéró vektor sajátvektora lenne.

20.2. Fölcserélhető operátorok teljes rendszere: CSCO

Itt az előző alszakaszban részben már jelzett kérdést vizsgáljuk, hogy mikor egyértelmű két vagy több egymással fölcserélhető operátor közös sajátvektorrendszere.

Az $A, B, C, \dots$ operátorok halmazát CSCO-nak (Complete Set of Commuting Operators) nevezzük,

(i) ha páronként fölcserélhetők és

(ii) ha megadjuk a sajátértékeiket, akkor azok egyértelműen (egy konstans szorzó erejéig) meghatározzák a közös sajátvektoraikat. Más szóval létezik egy egyértelműen meghatározott ortonormált bázis, amelyben a CSCO minden operátora diagonális.

Ha A és B CSCO-t alkot, akkor hozzávehetünk még olyan C -t, amely mind A -val mind B -vel kommutál, s ez továbbra is CSCO lesz, de általában olyan esetben szoktunk CSCO-ról beszélni, ha az operátorok halmaza maximális abban az értelemben, hogy közülük bármelyiket elhagyva a maradék már nem CSCO.

Megjegyezzük még, hogy ha A, B és C CSCO-t alkot és a sajátértékek $\alpha_k, \beta_l, \gamma_m$, akkor a megfelelő sajátvektorokat $|\alpha_k, \beta_l, \gamma_m\rangle$ -el is szokás jelölni, amelyek egyértelműen meg vannak határozva.

20.1 Feladat: Mutassuk meg, hogy tetszőleges A lineáris operátor fölbontható $A = B + iC$ alakba, ahol B és C önadjungált operátorok.

20.2 Feladat: Normálisnak nevezünk egy operátort, ha fölcserélhető az adjungáltjával. Mutassuk meg az előző feladat alapján, hogy minden normális operátor diagonalizálható.

20.3 Feladat: A 20.1 Feladatban megmutatott fölbontás nélkül, az önadjungált operátorokra vonatkozó spektráltétel gondolatmenetének alkalmas módosításával mutassuk meg, hogy minden normális operátor diagonalizálható.

20.4 Feladat: Mutassuk meg, hogy ha egy operátornak létezik a tér dimenziószámával megegyező számú egymásra páronként ortogonális sajátvektora, akkor az az operátor szükségképpen normális.

20.5 Feladat: Mutassuk meg, hogy ha az A és B fölcserélhető önadjungált operátor, továbbá $|\varphi_1\rangle$ és $|\varphi_2\rangle$ az A két különböző sajátértékéhez tartozó sajátvektora, akkor a $\langle\varphi_1|B|\varphi_2\rangle$ mátrixelem eltűnik.

21. A négyzetesen integrálható függvények tere, és az L^2 -höz nem tartozó bázisok

21.1. Az L^2 tér definíciója

L^2 térnek nevezzük azoknak a $\psi(x)$ valós változós komplex értékű függvényeknek a halmazát, amelyek valamely intervallumon – ez lehet a $(-\infty, \infty)$ is – négyzetesen integrálhatóak, azaz amelyekre a

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx \quad (21.1)$$

integrál létezik.

Megjegyezzük, hogy itt az integrálás szigorúan a Lebesgue-féle értelemben értendő [Riesz, SzNagy], tehát két függvény között, amelyek csak egy nulla mértékű halmazon térnek el egymástól nem tesszünk különbséget.

Az L^2 nyilván lineáris tér a függvények szokásos összeadására, illetve komplex számmal való szorzására nézve. Ezen a téren a belső szorzat, amelyet itt egyelőre $(\varphi(x), \psi(x))$ -ként írunk az alábbi határozott integrállal értelmezhető:

$$(\varphi(x), \psi(x)) := \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x)\psi(x)dx, \quad (21.2)$$

jelen esetben a $(-\infty, \infty)$ intervallumra.

21.1 Feladat: Mutassuk meg, hogy a fenti (21.2) definíció teljesíti a belső szorzat 18. szakaszban előírt tulajdonságait.

Meg lehet mutatni, hogy az L^2 téren létezik diszkrét bázis, azaz olyan megszámlálható $u_k(x)$, ($k = 1, 2, \dots$), függvényrendszer, amelynek segítségével *tetszőleges* négyzetesen integrálható függvény kifejezhető a

$$\psi(x) = \sum_k c_k u_k(x) \quad (21.3)$$

formula szerint. Az ilyen tulajdonságú $u_k(x)$ függvényrendszert *teljesnek* szokás nevezni. (Megjegyezzük, hogy az egyenlőség itt ismét az L^2 értelemben értendő, lásd az említett matematikai könyvet.) Az $u_k(x)$ függvényrendszer *ortogonális és normált*, ha az

$$\int u_k^*(x) u_{k'}(x) dx = \delta_{kk'} \quad (21.4)$$

összefüggés teljesül. Az alábbiakban mindig ilyen tulajdonságú bázisról lesz szó. A teljesség tehát azt jelenti, hogy tetszőleges $\psi(x)$ kifejezhető az $u_k(x)$ -ek szerint. A (21.3) kifejtést $u_{k'}^*(x)$ -el szorozva, és kihasználva az (21.4) ortonormalitási feltételt kapjuk, hogy

$$c_k = \int u_k^*(x) \psi(x) dx. \quad (21.5)$$

(Itt az integrálás és a végtelen összegzés fölcserélhető, ami a Lebesgue-integrál fontos tulajdonsága). Az utóbbi két összefüggés alapján írhatjuk, hogy:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_k c_k u_k(x) = \sum_k \left(\int u_k^*(x') \psi(x') dx' \right) u_k(x) = \\ &= \int \left(\sum_k u_k^*(x') u_k(x) \right) \psi(x') dx'. \end{aligned} \quad (21.6)$$

Mivel ez minden $\psi(x)$ -re fennáll (teljesség), így

$$\sum_k u_k^*(x') u_k(x) = \delta(x - x'), \quad (21.7)$$

s ez utóbbit is szokták a teljesség kifejezésének tekinteni.

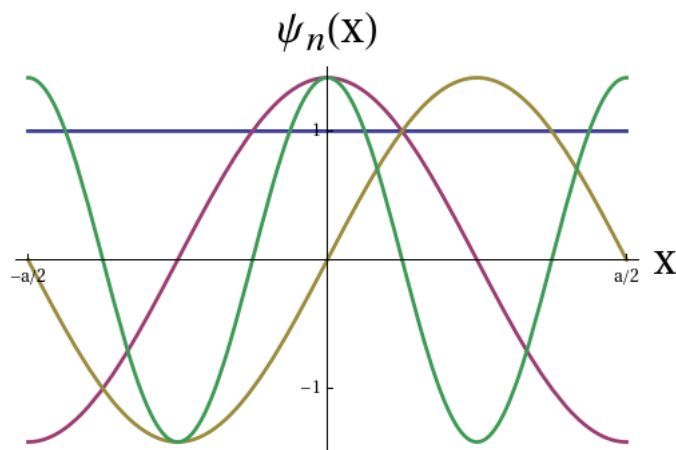
Példák:

1. Fourier-rendszer a $(-a/2, a/2)$ intervallumon értelmezett periodikus függvények terén:

$$\frac{1}{\sqrt{a}}, \quad \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{2\pi}{a} nx\right), \quad \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi}{a} nx\right), \quad n = 1, 2, \dots \quad (21.8)$$

vagy komplex változatban

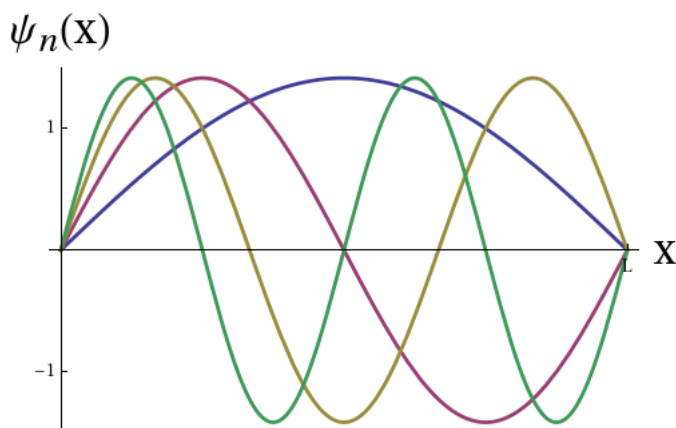
$$\frac{1}{\sqrt{a}} e^{i \frac{2\pi}{a} nx}, \quad n = 0, 1, \dots \quad (21.9)$$



51. ábra. A Fourier-rendszer első néhány függvényének grafikonja

2. A szinusz-rendszer a 0-ban és az L -ben eltűnő függvények terén:

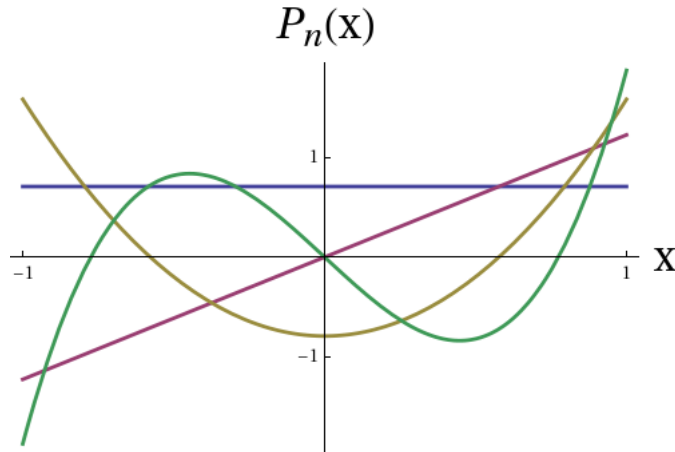
$$\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}nx\right) \quad (21.10)$$



52. ábra. A szinusz-rendszer első néhány függvényének grafikonja

3. A $P_l(x)$ Legendre-polinomok a $[-1, +1]$ intervallumon értelmezett négyzetesen integrálható függvények terén, melyeket az $1, x, x^2, x^3 \dots$ rendszer ortogonalizálásával kapunk:

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = (3x^2 - 1)/2, \quad (21.11)$$



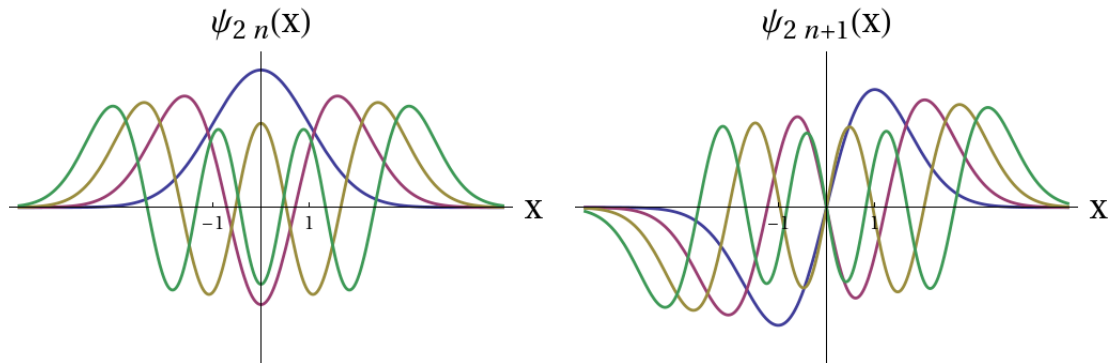
53. ábra. Az első néhány Legendre-polinom grafikonja

21.2 Feladat: Normáljuk az itt megadott Legendre-polinomokat, mutassuk meg, hogy ez a három ortogonális és keressük meg a harmad- és negyedrendű polinomot.

4. A Hermite-függvények:

$$\mathcal{N}_n e^{-x^2/2} H_n(x) \quad (21.12)$$

a $(-\infty, \infty)$ intervallumon, ahol $H_n(x)$ -ek az n -ed fokú polinomok, az úgynevezett Hermite-féle polinomok melyek közül az első három: $H_0(x) = 1$, $H_1(x) = 2x$, $H_2(x) = 4x^2 - 2$, és $\mathcal{N}_n$ -ek alkalmasan választott normálási tényezők.



54. ábra. Az első néhány páros illetve páratlan indexű Hermite-függvény grafikonja

Megjegyezzük, hogy a fenti példák mindegyike egyben a kvantummechanikában előforduló fontos differenciáloperátorok sajátfüggvényei is.

Lineáris operátorok az L^2 -n : pl. paritás egydimenzióban, a változóval való szorzás, a deriválás. A későbbiek szempontjából lényeges lesz, hogy a változóval való szorzás és a deriválás nem cserélhető föl.

21.3 Feladat: Mutassuk meg, hogy a paritás a fent (21.2) bevezetett integrállal értelmezett belső szorzatra nézve önadjungált és unitér.

21.4 Feladat: Mutassuk meg, hogy valós változós komplex függvényt a változóval szorozva önadjungált operátort adtunk meg.

21.5 Feladat: Igazoljuk, hogy a valós változós komplex függvények terén a deriválás viszont nem önadjungált operátor.

21.2. Az L^2 -höz nem tartozó, általánosított bázisok

21.2.1. Síkhullámok

Láttuk a korábbiakban, hogy a de Broglie által bevezetett p impulzusú állapotokhoz tartozó hullámfüggvények nem négyzetesen integrálhatóak, de belőlük egy folytonos szuperpozícióval ilyenek építhetők föl. Egy dimenzióban :

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} dp, \quad (21.13)$$

ahol mint a Fourier-transzformációk elméletéből tudjuk (Parseval-Plancherel-féle tétel):

$$\tilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} dx. \quad (21.14)$$

Jelöljük az itt szereplő de Broglie-féle (nulla időpillanatban vett) síkhullámot $v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$ -vel. Mint már volt szó róla, a $|v_p(x)|^2 = \frac{1}{2\pi}$ függvény nem integrálható a teljes $(-\infty, \infty)$ intervallumon. A fönti (21.13) integrált úgy tekintjük, mint egy kifejtést a $v_p(x)$ függvények szerint. Két ilyen bázisfüggvény skaláris szorzata a Dirac-delta ismert tulajdonsága (Fourier-előállítás) alapján a következő:

$$\int_{-\infty}^{\infty} v_p^*(x) v_{p'}(x) dx = \delta(p - p'), \quad (21.15)$$

amely egy "általánosított ortogonalitási reláció". A Fourier-transzformált és az inverze is létezik, ha $\psi(x)$ négyzetesen integrálható, és ha a

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) v_p(x) dp, \quad (21.16)$$

illetve a $\tilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} v_p^*(x) \psi(x) dx$ formában írjuk ezeket, akkor látható, hogy ezek hasonlóak az L^2 -beli diszkrét bázisok szerinti kifejtésekhez, és a teljesség a következőképpen írható:

$$\int_{-\infty}^{\infty} v_p(x') v_p^*(x) dx = \delta(x - x'). \quad (21.17)$$

A p folytonos paraméter által indexelt $v_p(x)$ függvények halmazát ezért *általánosított bázisnak* tekinthetjük, a bázis elemei a p paraméter értékében különböznek egymástól.

Három dimenzióban ezek a formulák hasonlóak, ott $v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}$.

21.2.2. Delta-függvények

Egy hasonló folytonos paraméterrel illetve paraméterekkel indexelhető általánosított bázist nyerhetünk, ha tekintjük a következő azonosságokat a háromdimenziós térben mozgó részecskét leíró

hullámfüggvényekre vonatkozóan. Legyen $\psi(\mathbf{r})$ egy négyzetesen integrálható függvény, ekkor a $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ Dirac-delta definíciója szerint, nyilvánvalóan fennáll:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\mathbf{r}_0) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) d^3\mathbf{r}_0, \quad (21.18)$$

$$\psi(\mathbf{r}_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) d^3\mathbf{r}. \quad (21.19)$$

Az első formula ezek közül úgy interpretálható, hogy a $\psi(\mathbf{r})$ függvényt kifejtettük a $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ általánosított bázisvektorok szerint, amelyeket az $\mathbf{r}_0$ folytonos paraméter indexel, és a $\psi(\mathbf{r}_0)$ kifejtési együtthatók egybe esnek a kérdéses függvény értékeivel az $\mathbf{r}_0$ helyeken. A második formulát az elsőből megkaphatjuk úgy is, hogy az első megszorozzuk a $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_0)$ komplex konjugáltjával, amely valós lévén megegyezik önmagával, és kihasználjuk az

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_0) d^3\mathbf{r}_0 = \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}'_0) \quad (21.20)$$

általánosított "ortogonalitási relációt".

21.2.3. Egyéb általánosított bázisok

A kvantummechanikában előfordul az az eset is, amikor egy négyzetesen integrálható hullámfüggvényt egy – a fentiektől különböző – az L^2 -be nem tartozó általánosított bázisvektoroknak tekinthető $w_\alpha(\mathbf{r})$ függvényeken fejtünk ki a $c(\alpha)$ függvényekkel, mint kifejtési együtthatókkal:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} c(\alpha) w_\alpha(\mathbf{r}) d\alpha, \quad (21.21)$$

ahol a $w_\alpha(\mathbf{r})$ -ek a következő tulajdonságúak:

$$\int_{-\infty}^{\infty} w_\alpha^*(\mathbf{r}) w_{\alpha'}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \delta(\alpha - \alpha'). \quad (21.22)$$

22. A koordináta és az impulzus operátora, általánosított sajátvektorok

Ha az A fizikai mennyiség spektruma diszkrét és a lehetséges mérési kimenetek az α_i eredményeket adják, akkor az $A = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$ operátornak megfelelő berendezésen való áthaladás (fizikai mennyiség mérése) során az egyes kimenetek valószínűségi amplitúdóit a $|\psi\rangle = \sum_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|\psi\rangle$ kifejtésnek megfelelő $\langle \varphi_i|\psi\rangle$ számok adják. A fizikai mennyiségek között azonban a kvantumelméletben is vannak olyanok, amelyek folytonos értékeket vehetnek föl. Ilyen pl. a koordináta, amelynek most csak egyik derékszögű komponensét vizsgáljuk. Legyen ez x . Jelöljük $\langle x|\psi\rangle$ -vel annak a valószínűségi amplitúdóját, hogy a részecskét a mérés után az x helyen találjuk. Ezeket az $\langle x|\psi\rangle$ komplex számokat az összes lehetséges x -re tekintve, az x egy komplex függvényét kapjuk, amelyet $\langle x|\psi\rangle \equiv \psi(x)$ -szel szokás jelölni. Dirac nyomán az $|x\rangle$ -et is szoktuk (általánosított) állapotnak nevezni, noha ez szigorúbb értelemben nem az, amint az alább kiviláglik. Föltételezésünk szerint ezek az $|x\rangle$ állapotok azt írják le, hogy a részecske az x helyen van. Mivel ezek az x -ek bármilyen valós számok lehetnek, az $|x\rangle$ állapotok kontinuum számosságúak. Föltételezzük, hogy ezek egy

teljes rendszert alkotnak általánosított értelemben, azaz segítségükkel bármely állapot kifejthető folytonos módon:

$$|\psi\rangle = \int |x\rangle \langle x|\psi\rangle dx. \quad (22.1)$$

Egy diszkrét sajátértékekkel bíró $A = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$ spektrálfölbontású operátor analogonjára bevezetjük az X helykoordináta operátort, amelynek az általánosított spektrális előállítása

$$X = \int x |x\rangle \langle x| dx \quad (22.2)$$

alakú.

Ennek általánosított sajátvektorai az $|x\rangle$ -ek, amelyekkel a (22.1) föltételezés alapján minden közönséges $|\psi\rangle$ állapot kifejthető. Valóban, ha (22.1)-et balról formálisan megszorozzuk az $\langle x'|$ -vel, akkor az $\langle x'|\psi\rangle = \int \langle x'|x\rangle \langle x|\psi\rangle dx$ összefüggést nyerjük, vagyis a $\psi(x') = \int \langle x'|x\rangle \psi(x) dx$ integrális kapcsolatot. Látható, hogy ha kikötjük, hogy ez minden x' -re érvényes maradjon, akkor az $\langle x'|x\rangle$ belső szorzatra a $\delta(x-x')$ adódik, ami mutatja, hogy ezek a koordináta sajátállapotok a közönséges értelemben nem normálhatók.

A belső szorzatot ebben a reprezentációban

$$\langle \varphi|\psi\rangle = \int \langle \varphi|x\rangle \langle x|\psi\rangle dx = \int \varphi^*(x) \psi(x) dx, \quad (22.3)$$

azaz a két függvény szorzatának integráljaként lehet fölírni, ami valóban megfelel az L^2 térben vett belső szorzatnak, ha $\psi(x)$ és $\varphi(x)$ normálható függvények. Az X operátor hatása koordinátareprezentációban a következő:

$$\langle x|X|\psi\rangle = \int x' \langle x|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle dx' = \int x' \delta(x-x') \psi(x') dx' = x\psi(x), \quad (22.4)$$

amit néha így is fogunk írni:

$$\hat{X}\psi(x) = x\psi(x). \quad (22.5)$$

Az $\hat{X}$ jelölés a kalappal az X operátor koordinátareprezentációban való hatására utal.

Hasonlóan be lehet vezetni az impulzus-sajátállapotokat is, mint a

$$P = \int p |p\rangle \langle p| dp \quad (22.6)$$

operátor sajátállapotait. A

$$|\psi\rangle = \int |p\rangle \langle p|\psi\rangle dp = \int |p\rangle \tilde{\psi}(p) dp \quad (22.7)$$

kifejtésből:

$$\psi(x) \equiv \langle x|\psi\rangle = \int \langle x|p\rangle \langle p|\psi\rangle dp = \int \langle x|p\rangle \tilde{\psi}(p) dp, \quad (22.8)$$

amiből (21.13) szerint:

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}. \quad (22.9)$$

Valóban, de Broglie nyomán, mint a történeti részből tudjuk, annak az amplitúdóját, hogy egy p impulzusú részecskét az x helyen találunk az időtől függő $e^{-iEt/\hbar}$ fázisszorzó erejéig éppen a (22.9) által megadott képlet adja. Ebből következik – de a $\langle p|\psi\rangle = \int \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle dx$ ből is látható – hogy

$$\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar}. \quad (22.10)$$

Eszerint a $|\psi\rangle$ állapot koordináta- és impulzusreprezentációban vett alakja között a következő kapcsolat van:

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p | \psi \rangle = \int \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx, \quad (22.11)$$

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle = \int \langle x | p \rangle \langle p | \psi \rangle dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{ipx/\hbar} \tilde{\psi}(p) dp. \quad (22.12)$$

Vagyis látható, hogy a koordinátareprezentációban vett hullámfüggvény az impulzusreprezentációban vett hullámfüggvény Fourier-transzformáltja és fordítva, amit már korábban is láttunk, vagyis a szokásos Fourier-transzformációs képletek úgy is tekinthetők, mint a reprezentáció-transzformáció speciális esete.

Az impulzus operátora koordinátareprezentációban:

$$\begin{aligned} \langle x | P | \psi \rangle &= \int \langle x | P | p \rangle \langle p | \psi \rangle dp = \int p \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \tilde{\psi}(p) dp = \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \tilde{\psi}(p) dp = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) =: \hat{P}\psi(x). \end{aligned} \quad (22.13)$$

Általában háromdimenziós esetben:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{P} | \psi \rangle = -i\hbar \nabla \psi(\mathbf{r}). \quad (22.14)$$

Egyszerűen bizonyíthatóan X és P önadjungált operátorok.

Most megkeressük X és P sajátfüggvényeit koordinátareprezentációban. Keressük először tehát azt a $\psi_a(x)$ függvényt amelyre

$$\hat{X}\psi_a(x) = x\psi_a(x) = a\psi_a(x) \quad (22.15)$$

minden x -re:

$$(x - a)\psi_a(x) = 0. \quad (22.16)$$

Ez minden x -re csak úgy állhat fenn, ha $\psi_a(x) = 0$ mindenhol ahol $x \neq a$, és nem föltétlenül 0, ahol $x = a$. Ha ott is nulla lenne, akkor $\psi_a(x)$ azonosan mindenütt 0 lenne, ezért előírjuk, hogy az $x = a$ -ban nem 0 hanem legyen ott a $\psi_a(x) = \langle x | a \rangle = \delta(x - a)$ -nak megfelelő "függvény", s így (22.16) mindenhol fönnáll. Az impulzus esetén a

$$\hat{P}\psi_p(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_p(x) = p\psi_p(x) \quad (22.17)$$

egyenlet megoldása

$$\psi_p(x) = C e^{ipx/\hbar}, \quad (22.18)$$

ahol a C integrációs állandót tetszőlegesen választhatjuk, s ha ez éppen $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ akkor látjuk, hogy $\psi_p(x) = v_p(x)$.

22.1. X és P nem fölcserélhető

X, Y, Z egymás közt fölcserélhető, hasonlóan P_x, P_y, P_z . Vizsgáljuk $(XP_x - P_xX) |\psi\rangle$ -t koordinátareprezentációban. Legyen $|\chi\rangle := P_x |\psi\rangle$ és $|\phi\rangle := X |\psi\rangle$, ekkor

$$\langle \mathbf{r} | \chi \rangle \equiv \chi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | P_x | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (22.19)$$

$$\langle \mathbf{r} | \phi \rangle \equiv \phi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | X | \psi \rangle = x\psi(\mathbf{r}), \quad (22.20)$$

így

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | (XP_x - P_xX) | \psi \rangle &= \langle \mathbf{r} | XP_x | \psi \rangle - \langle \mathbf{r} | P_xX | \psi \rangle = \langle \mathbf{r} | X | \chi \rangle - \langle \mathbf{r} | P_x | \phi \rangle = \\ &= x\chi(\mathbf{r}) + i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial x} = -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\psi(\mathbf{r})) = \\ &= i\hbar \psi(\mathbf{r}) = i\hbar \langle \mathbf{r} | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (22.21)$$

Ebből $(XP_x - P_xX)|\psi\rangle = i\hbar|\psi\rangle$ minden $|\psi\rangle$ -re (amelyre a kommutátor értelmezve van). Így

$$XP_x - P_xX \equiv [X, P_x] = i\hbar. \quad (22.22)$$

22.1 Feladat: Adjuk meg az X operátor hatását impulzus-reprezentációban.

22.2 Feladat: Teljes indukcióval bizonyítsuk, hogy $[X^n, P_x] = i\hbar nX^{n-1}$

22.3 Feladat: Az előző feladat alapján lássuk be, hogy $[f(X), P_x] = i\hbar \frac{d}{dx}f(X)$, ha $f(X)$ az X operátor elegendően síma függvénye.

23. A kvantummechanika posztulátumai

1. *A fizikai rendszer lehetséges (tiszta) állapotait egy alkalmasan választott Hilbert-tér, az állapottér $|\psi\rangle$ vektorai adják meg.*

Ebben benne van a szuperpozíció elve, hiszen a vektorok lineáris kombinációi is vektorok, tehát ezek is a fizikai rendszer lehetséges állapotai. A tiszta jelző itt arra utal, hogy az állapot a rendszerről lehetséges legtöbb információt tartalmazza, az állapotot már preparáltuk. A 2. szakaszban tárgyalt példa esetén pl. a foton már áthaladt egy polarizátoron és tudjuk, hogy ez után milyen a polarizációs állapota. Egy természetes, polarizálatlan forrásból érkező fotonok állapotáról nem tudunk mit mondani, azok polarizálatlanok, s így egy ilyen foton nincs tiszta állapotban, állapotát *keveréknek* nevezzük. A tiszta állapot elemzésére alább még visszatérünk, a keverék állapotok matematikai jellemzésével itt nem foglalkozunk.

2. *A fizikai mennyiségeknek az állapottéren értelmezett lineáris és önadjungált operátorok felelnek meg.*

Egy fizikai mennyiséget egy mérőberendezéssel állapítunk meg, az önadjungált operátorokra tehát úgy tekinthetünk, mint amelyek egy ilyen berendezés matematikai megfelelői. Egy fizikai mennyiséget ezért néha “megfigyelhető mennyiségnek” (observable) is szokás nevezni.

3. *Az A operátorral jellemzett fizikai mennyiség lehetséges mért értékei az operátor valamelyik α sajátértéke.*

Ezek a sajátértékek, mint tudjuk valós számok, és lehetnek diszkrétnek, azaz kvantáltak, de lehetnek folytonos változók is.

4. *Ha az A fizikai mennyiséget mérjük a normált $|\psi\rangle$ ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$) állapotban, akkor*

(i) *diszkrét spektrum esetén annak a valószínűsége, hogy az α_n sajátértéket kapjuk eredményül*

$$\mathcal{P}(\alpha_n) = \langle\psi|E_n|\psi\rangle, \quad (23.1)$$

ahol E_n az A operátor α_n sajátértékéhez tartozó sajátalterére vetítő projekciós operátor;

(ii) *folytonos spektrum esetén annak a valószínűsége, hogy a mért általánosított sajátérték α az (α_1, α_2) intervallumba esik*

$$\mathcal{P}(\alpha_1 < \alpha < \alpha_2) = \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \langle\psi|E_\alpha|\psi\rangle d\alpha, \quad (23.2)$$

ahol E_α az α általánosított sajátértékhez tartozó projekció.

A fenti kijelentéseket egy kissé másképpen is megfogalmazhatjuk. Tekintsük először a diszkrét spektrum esetét. Ha $|u_n^i\rangle$ az α_n sajátértékhez tartozó sajátalter egy ortonormált bázisa, azaz $A|u_n^i\rangle = \alpha_n|u_n^i\rangle$ ($i = 1, 2, \dots, g_n$), azaz az α_n sajátérték g_n -szeresen degenerált, akkor $E_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i|$, s így (23.1) szerint

$$\mathcal{P}(\alpha_n) = \langle\psi|E_n|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} \langle\psi|u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2. \quad (23.3)$$

Az $\langle u_n^i | \psi \rangle = c_n^i$ jelöléssel, amelyek a $|\psi\rangle$ állapot kifejtési együtthatói az altérben lévő bázisvektorok szerint

$$\mathcal{P}(\alpha_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2. \quad (23.4)$$

Az eredmény független az $|u_n^i\rangle$ bázis konkrét választásától, hiszen a (18.4) alpontban láttuk, hogy a projekció egyértelmű. A valószínűséget szemléletesen úgy kapjuk, hogy a $|\psi\rangle$ vektort levetítjük az E -nek megfelelő síkra, majd a vetület hosszának négyzetét vesszük.

Abban a legegyszerűbb esetben, amikor α_n nem degenerált, azaz $g_n = 1$, akkor

$$\mathcal{P}(\alpha_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2 = |c_n|^2, \quad (23.5)$$

azaz a kérdéses valószínűség éppen a mérés előtti $|\psi\rangle$ állapot és az $|u_n\rangle$ sajátállapot belső szorzatának az abszolútérték-négyzete, vagy szemléletesen a $|\psi\rangle$ -nek az $|u_n\rangle$ irányába eső vetületének a négyzete.

Folytonos spektrum esetén, azaz ha $A|w_\alpha^\beta\rangle = \alpha|w_\alpha^\beta\rangle$, ahol α folytonos paraméter, és $|w_\alpha^\beta\rangle$ -k általánosított sajátvektorok, amelyek egy további – mondjuk folytonos – β degenerációs paraméterrel is indexelhetők, akkor $E_\alpha = \int |w_\alpha^\beta\rangle \langle w_\alpha^\beta| d\beta$, s így annak a valószínűsége, hogy a mért érték az α_1 és α_2 értékek közé esik:

$$\mathcal{P}(\alpha_1 < \alpha < \alpha_2) = \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \int_{\beta} |\langle w_\alpha^\beta | \psi \rangle|^2 d\beta d\alpha, \quad (23.6)$$

ahol a második integráljel alsó β indexe azt jelzi, hogy az összes lehetséges β -ra integrálni kell. Ha a mért mennyiség spektruma folytonos, de a degeneráció diszkrét, illetve ha a mért mennyiség diszkrét és a degeneráció folytonos, akkor a fenti összefüggések értelemszerűen módosulnak. Ezekre a későbbiekben látunk példát.

5. Ha az A operátorral jellemzett fizikai mennyiség mérése a $|\psi\rangle$ normált állapotban az α_n diszkrét sajátértéket adja, akkor a mérés után közvetlenül a rendszer állapota a

$$|\psi'\rangle = E_n |\psi\rangle / \sqrt{\langle \psi | E_n | \psi \rangle} \quad (23.7)$$

normált vektor, ahol E_n az α_n -nek megfelelő altérre vetítő projekciós operátor.

Ha a mért mennyiségnek megfelelő operátor spektruma folytonos, akkor a mérési eredményről szükségképpen csak annyi állapítható meg, hogy α valamely $\Delta\alpha = \alpha_2 - \alpha_1$ intervallumba esik, mert egy folytonos változónak mindig van valamilyen hibája, egy ilyen mérés nem elegendően teljes. Ekkor a mérés után az állapot

$$|\psi'\rangle = E_{\Delta\alpha} |\psi\rangle / \sqrt{\langle \psi | E_{\Delta\alpha} | \psi \rangle}, \quad (23.8)$$

ahol

$$E_{\Delta\alpha} = \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \int_{\beta} |w_\alpha^\beta\rangle \langle w_\alpha^\beta| d\beta d\alpha \quad (23.9)$$

és (23.6)-hoz hasonlóan egy folytonos degenerációt is föltételeztünk. Ezt a posztulátumot szokás *redukciós posztulátumnak* nevezni.

A legegyszerűbb esetben, ha a diszkrét spektrumhoz tartozó α_n nem degenerált, és $A|u_n\rangle = \alpha_n|u_n\rangle$ akkor a végállapot éppen $|u_n\rangle$ egy egységnyi abszolút értékű konstansszorosa vagyis egy az α_n sajátértékhez tartozó normált sajátvektor. Ugyanis ekkor $E_n = |u_n\rangle \langle u_n|$, s így

$$|\psi'\rangle = E_n |\psi\rangle / \sqrt{\langle \psi | E_n | \psi \rangle} = |u_n\rangle \langle u_n | \psi \rangle / \sqrt{\langle \psi | u_n \rangle \langle u_n | \psi \rangle} = |u_n\rangle \frac{\langle u_n | \psi \rangle}{|\langle u_n | \psi \rangle|}. \quad (23.10)$$

Ha α_n degenerált, akkor $E_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i|$. Így a mérés utáni állapot $\sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle / \sqrt{\sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2}$, ahol a $c_n^i = \langle u_n^i | \psi \rangle$.

6. Az állapot időfejlődését a Schrödinger-egyenlet adja meg:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = H |\Psi\rangle. \quad (23.11)$$

ahol a H a rendszer energiájának megfelelő operátor, a Hamilton-operátor. Ennek és általában egyéb operátorok konkrét alakjának megadásához az elmélet bizonyos iránymutatásokat ad, lásd alább a kvantálási szabályokra vonatkozó pontot. De csakúgy mint ahogyan a klasszikus mechanikában a Hamilton-függvényt, vagy az erőtvények alakját a Newton-féle törvények nem rögzítik, ugyanúgy az operátorok konkrét alakjának megadása sem része a kvantummechanika posztulátumainak.

7. *Sokrészecskerendszerekre vonatkozó posztulátum, amelyből speciálisan következik a Pauli-elv.*
Ezt a posztulátumot később fogjuk kimondani.

A posztulátumokat kiegészítjük még az úgynevezett kvantálási szabályokkal. Legyen $\mathcal{A}$ klasszikus fizikai mennyiség, a koordináta és impulzus valamilyen függvénye $\mathcal{A}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. A megfelelő kvantummechanikai operátort úgy kapjuk, hogy az $A_s(\mathbf{R}, \mathbf{P})$ operátort tekintjük, ahol A_s az $\mathbf{R}$ és $\mathbf{P}$ szimmetrizált függvénye.

Bizonyos esetekben azonban az operátort más megfontolások alapján keressük meg. Azt, hogy az így vagy úgy fölirt operátor alakja helyes-e, az eredményekből levont fizikai következtetések helyessége, azaz a modell konzisztenciája dönti el. Ez hasonló ahhoz, ahogyan a klasszikus fizikában az erőtvények helyes alakját az dönti el, hogy a megfelelő mozgásegyenletből következő megoldás, azaz a koordináták és impulzusok időfüggése megegyezik-e a tapasztalattal.

24. Mérések, középérték, szórás

A kvantummechanikában egy $\mathcal{A}$ fizikai mennyiség mérésekor kapott eredmény a véletlentől függ, azaz matematikai értelemben a mérési eredmény egy valószínűségi változó. Ha az $\mathcal{A}$ fizikai mennyiséghez tartozó operátor A , akkor a 3. posztulátum szerint a mért eredmények az A sajátértékei. Tekintsünk egy mérési sorozatot, amelyet olyan részecskéken mérünk, amelyek mindegyike a mérés előtt azonos $|\psi\rangle$ állapotban van, tehát ezeket előzőleg már preparáltuk. Tegyük föl először, hogy a mért sajátértékek diszkrét, és jelöljük N_k -val azt a számot, ahányszor a mérési eredmény α_k -nak adódott.

Ekkor a mért mennyiségek számtani közepét $\langle \mathcal{A} \rangle$ -val jelölve:

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \frac{1}{N} \sum_k N_k \alpha_k, \quad (24.1)$$

ahol $N = \sum_k N_k$ az összes mérések száma. Az $\frac{N_k}{N}$ számot, amelyre érvényes, hogy $0 \leq \frac{N_k}{N} \leq 1$, az α_k mérés relatív gyakoriságának nevezzük. A (24.1) képlet a kísérletek nyomán kapható középérték, most ezt a formulát extrapolálva $N \rightarrow \infty$ esetre, egy elméleti eredményt írunk le.

Ha az N szám egyre nagyobb, illetve gondolatban a végtelenbe tart, akkor az $\frac{N_k}{N}$ hányados tart az α_k mérésének valószínűségéhez

$$\frac{N_k}{N} \rightarrow \mathcal{P}(\alpha_k). \quad (24.2)$$

A fenti (24.1) összegből így kapott határértéket az $\mathcal{A}$ fizikai mennyiség, illetve a kvantummechanikában inkább az A operátor várható értékének nevezzük és $\langle A \rangle$ -val jelöljük:

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_k \mathcal{P}(\alpha_k) \alpha_k. \quad (24.3)$$

A valószínűségszámításban ezt a mennyiséget a mérési eredmény, mint valószínűségi változó *várható értékének* nevezzük. A kvantummechanika 4. posztulátuma szerint a $\mathcal{P}(\alpha_k)$ valószínűséget meg tudjuk határozni a mért bemenő állapot, illetve az A operátor sajátvektorai segítségével. A posztulátum szerint $\mathcal{P}(\alpha_k) = \sum_i |\langle u_k^i | \psi \rangle|^2$ ha az α_k degenerált. Ha α_k nem degenerált, akkor ez az utóbbi

összeg csak egy tagból áll. Így

$$\begin{aligned}\langle A \rangle_\psi &= \sum_k \sum_i |\langle u_k^i | \psi \rangle|^2 \alpha_k = \sum_k \sum_i \langle \psi | u_k^i \rangle \langle u_k^i | \psi \rangle \alpha_k = \\ &= \sum_k \sum_i \langle \psi | \alpha_k u_k^i \rangle \langle u_k^i | \psi \rangle = \sum_k \sum_i \langle \psi | A u_k^i \rangle \langle u_k^i | \psi \rangle = \langle \psi | A \psi \rangle.\end{aligned}\quad (24.4)$$

Ha a kérdéses mért mennyiség folytonos változó, azaz az operátor spektruma folytonos, akkor jelöljük N_k -val azt a számot, ahányszor a mérési eredményünk a $\Delta\alpha_k = \alpha_{k+1} - \alpha_k$ intervallumba esik, ahol α_k a lehetséges mérési értékeket megadó valós egyenes vagy szakasz egy diszkrét beosztása. Ekkor $N_k/N \approx \mathcal{P}(\tilde{\alpha}_k)\Delta\alpha_k$, ahol $\tilde{\alpha}_k$ egy a $\Delta\alpha_k$ intervallumba eső érték. Ezt tekintjük a $\mathcal{P}(\tilde{\alpha}_k)$ definíciójának. Ebből a mérési eredmények számtani közepe $\sum_k \tilde{\alpha}_k \mathcal{P}(\tilde{\alpha}_k)\Delta\alpha_k$, ami N növelése és a beosztás finomítása esetén az $\int \alpha \mathcal{P}(\alpha) d\alpha$ integrálhoz tart:

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_k \tilde{\alpha}_k \mathcal{P}(\tilde{\alpha}_k) \Delta\alpha_k \rightarrow \int \alpha \mathcal{P}(\alpha) d\alpha = \int \alpha |\langle w_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha = \langle \psi | A \psi \rangle, \quad (24.5)$$

ahol most $|w_\alpha\rangle$ az A operátor nemdegenerált α általánosított sajátértékéhez tartozó általánosított sajátvektora.

A várható érték lineáris a következő értelemben:

$$\langle A + B \rangle_\psi = \langle A \rangle_\psi + \langle B \rangle_\psi, \quad \langle cA \rangle_\psi = c \langle A \rangle_\psi. \quad (24.6)$$

Egy másik mennyiség a – valószínűségi számításban szintén használt – *szórás*, amely az átlagtól való közepes négyzetes eltérés négyzetgyöke. A fizikai mennyiség szórásnégyzetét a

$$(\Delta A)_\psi^2 = \langle (A - \langle A \rangle_\psi)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle_\psi - \langle A \rangle_\psi^2 \quad (24.7)$$

összefüggés definiálja. Ennek (pozitív) négyzetgyöke a szórás. Megmutatjuk, hogy a szórás akkor és csak akkor 0, ha a rendszer a mért A operátor sajátállapotában van. Legyen ugyanis

$$\langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle (A - \langle A \rangle) \psi | (A - \langle A \rangle) \psi \rangle = 0. \quad (24.8)$$

A 0-val való egyenlőség – a belső szorzat pozitív definit volta miatt – akkor és csak akkor érvényes, ha $(A - \langle A \rangle) | \psi \rangle = 0$. Ez utóbbit az

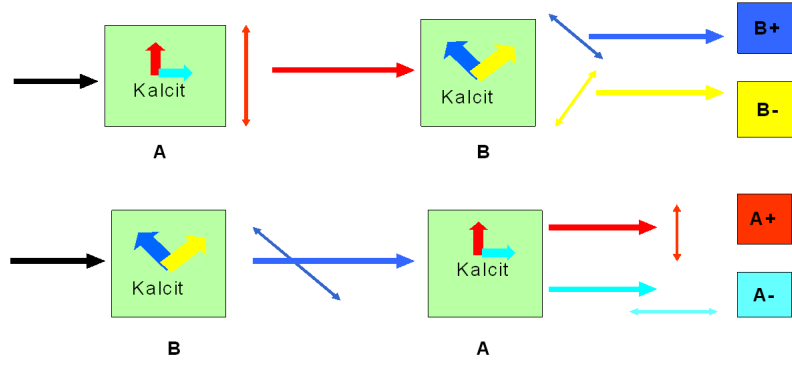
$$A | \psi \rangle = \langle A \rangle | \psi \rangle \quad (24.9)$$

alakba írva látható, hogy ilyenkor $| \psi \rangle$ éppen egy sajátállapot. Valóban, a sajátállapotokon végrehajtott mérés mindig ugyanazt a hozzá tartozó α sajátértéket adja eredményül, s ekkor ezek várható értéke ugyanez a sajátérték, és a szórás nyilvánvalóan 0.

Kiemeljük, hogy mind az $\langle A \rangle$ várható érték, mind a szórás függ attól a $| \psi \rangle$ állapottól, amelyen a méréseket végrehajtjuk.

25. Heisenberg-egyenlőtlenség

Ha két fizikai mennyiség operátora fölcserélhető, akkor mint láttuk, létezik olyan bázis, amely mindkét operátornak egyszerre sajátvektorrendszere. Ezeken az állapotokon hajtva végre a mérést, mindkét mennyiség szórásmentesen mérhető. Ha viszont a két operátor nem fölcserélhető, akkor általában nincs ilyen bázisvektorrendszer és ekkor azt szokás mondani, hogy a két mennyiség nem mérhető “egyidejűleg”, noha itt időről valójában nincsen szó. Szimbolikusan mutatja ezt az eredményt az 55. ábra.



(1) A után B illetve (2) B után A esetén a kimenet
biztosan különbözik egymástól,
A és B inkompatibilis

55. ábra. A két mennyiséget, A-t és B-t mérve különböző sorrendben az eredmény nem ugyanaz.

Ha a két mennyiség operátora nem fölcserélhető, akkor tetszőleges állapotban fönnáll egy, a mért mennyiségek, azaz a megfelelő operátorok szórására vonatkozó egyenlőtlenség. Ha A és B önadjungált operátorok, és ezek nem fölcserélhetők, akkor kommutátoruk

$$[A, B] = iC, \quad (25.1)$$

ahol C szükségképpen önadjungált operátor. Ez esetben érvényes az alábbi:

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq |\langle C \rangle|/2 \quad (25.2)$$

Heisenberg- vagy Heisenberg-Robertson-egyenlőtlenségnek nevezett összefüggés.

A bizonyításhoz tekintsük először a lineáris vektorterekben értelmezett belső szorzat egy fontos tulajdonságát az ún. Cauchy-Bunyakovszkij-Schwarz-(Weyl)-egyenlőtlenséget (CBS), amely szerint két tetszőleges vektor $|\varphi\rangle$ és $|\chi\rangle$ esetén

$$\langle \varphi | \varphi \rangle \langle \chi | \chi \rangle \geq |\langle \varphi | \chi \rangle|^2, \quad (25.3)$$

és egyenlőség akkor és csak akkor lehetséges, ha a két vektor valamelyike a zéró vektor, vagy ha a két vektor arányos egymással azaz $|\varphi\rangle = \lambda |\chi\rangle$, ahol λ valamilyen komplex szám.

Bizonyítás: Ha $|\chi\rangle = 0$, vagy ha $|\varphi\rangle = 0$ akkor mindkét oldalon 0 áll, és az egyenlőtlenség (egyenlőség formájában) nyilvánvalóan teljesül. Legyenek ezután $|\varphi\rangle$, $|\chi\rangle \neq 0$ tetszőleges vektorok és λ tetszőleges komplex szám. Tekintsük a $|\varphi - \lambda\chi\rangle$ önmagával vett belső szorzatát, azaz a vektor normájának négyzetét, amely definíció szerint nemnegatív: $\langle \varphi - \lambda\chi | \varphi - \lambda\chi \rangle \geq 0$, és akkor és csak akkor 0, ha $|\varphi - \lambda\chi\rangle$ maga a zéró vektor. Eszerint $0 \leq \langle \varphi - \lambda\chi | \varphi - \lambda\chi \rangle = \langle \varphi | \varphi \rangle + |\lambda|^2 \langle \chi | \chi \rangle - \lambda \langle \varphi | \chi \rangle - \lambda^* \langle \chi | \varphi \rangle$, ahol λ tetszőleges. Legyen speciálisan $\lambda = \langle \chi | \varphi \rangle / \langle \chi | \chi \rangle$. Ekkor $0 \leq |\varphi|^2 + |\lambda|^2 |\chi|^2 - \lambda \langle \varphi | \chi \rangle - \lambda^* \langle \chi | \varphi \rangle = |\varphi|^2 + |\langle \varphi | \chi \rangle|^2 / \langle \chi | \chi \rangle - |\langle \varphi | \chi \rangle|^2 / \langle \chi | \chi \rangle - |\langle \varphi | \chi \rangle|^2 / \langle \chi | \chi \rangle$, amiből átrendezéssel következik, hogy $\langle \varphi | \varphi \rangle \langle \chi | \chi \rangle \geq |\langle \varphi | \chi \rangle|^2$. Látható, hogy valóban egyenlőség van, ha $|\varphi\rangle = \lambda |\chi\rangle$, és fordítva, ha $\langle \varphi | \varphi \rangle \langle \chi | \chi \rangle = |\langle \varphi | \chi \rangle|^2$, akkor $\lambda = \langle \chi | \varphi \rangle / \langle \chi | \chi \rangle$ választásával $\langle \varphi - \lambda\chi | \varphi - \lambda\chi \rangle = 0$, amiből következik, hogy $|\varphi\rangle = \lambda |\chi\rangle$. $\square$

Most áttérünk a (25.2) egyenlőtlenség bizonyítására. Legyen $|\psi\rangle$ tetszőleges nem zéró vektor, és jelöljük A várható értékét a $|\psi\rangle$ állapotban $\langle A \rangle$ -val, $\langle A \rangle = \langle \psi | A \psi \rangle$, és hasonlóan legyen $\langle B \rangle = \langle \psi | B \psi \rangle$. Legyen most

$$|\varphi\rangle = (A - \langle A \rangle) |\psi\rangle, \quad (25.4)$$

illetve

$$|\chi\rangle = (B - \langle B \rangle) |\psi\rangle. \quad (25.5)$$

Ekkor a $|\psi\rangle$ állapotban vett szórás definíciója szerint:

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = (\Delta A)^2, \quad \text{illetve} \quad \langle\chi|\chi\rangle = (\Delta B)^2, \quad (25.6)$$

továbbá

$$\begin{aligned} |\langle\varphi|\chi\rangle|^2 &= |\langle(A - \langle A\rangle)\psi|(B - \langle B\rangle)\psi\rangle|^2 = \\ &= |\langle\psi|(A - \langle A\rangle)(B - \langle B\rangle)\psi\rangle|^2 = |\langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle|^2. \end{aligned} \quad (25.7)$$

Beírva ezeket a CBS-egyenlőtlenségbe kapjuk, hogy

$$|\langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle|^2 \leq (\Delta A)^2(\Delta B)^2. \quad (25.8)$$

A bal oldalon $\langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$ abszolút érték négyzetét a valós és képzetes rész négyzetösszegeként számítjuk ki. A második tag itt valós, mert A és B önadjungált, tehát várható értékük valós. Az első tagban az AB operátor várható értékét bontsuk föl az operátor szimmetrikus és antiszimmetrikus részének várható értékére, azaz tekintsük a következő azonosságot:

$$\langle AB\rangle \equiv \left\langle \frac{1}{2}(AB + BA) + \frac{1}{2}(AB - BA) \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2}(AB + BA) + i\frac{1}{2}C \right\rangle, \quad (25.9)$$

ahol kihasználtuk, hogy az antiszimmetrikus tag éppen A és B kommutátorának a fele, azaz $iC/2$. Az első tag – a szimmetrikus rész – egyszerűen láthatóan önadjungált, tehát várható értéke valós, míg $iC/2$ várható értéke tiszta képzetes $i\langle C\rangle/2$. A (25.8) bal oldalán álló abszolút érték négyzetéhez $\langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$ valós része

$$\left\langle \frac{1}{2}(AB + BA) \right\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle =: \sigma_{AB}, \quad (25.10)$$

amelyet az A és B operátorok *korrelációjának* nevezünk a $|\psi\rangle$ állapotban. $\langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$ képzetes része viszont éppen $\langle C\rangle/2$. Így a (25.8) bal oldalán szereplő abszolút érték négyzet, vagyis a valós

és képzetes rész abszolút értékének négyzetösszege $\sigma_{AB}^2 + \frac{1}{4}|\langle C\rangle|^2$, azaz (25.8) a következőképpen írható

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq \sigma_{AB}^2 + |\langle C\rangle|^2/4. \quad (25.11)$$

Ez a Heisenberg-Robertson-egyenlőtlenség erős alakja. Az egyenlőtlenség láthatóan a

$$\sigma_{AA}\sigma_{BB} - \sigma_{AB}^2 \geq |\langle C\rangle|^2/4 \quad (25.12)$$

formába is írható. Ennek az egyenlőtlenségnek azonban gyakran egy gyöngébb alakját használjuk. Mivel σ_{AB}^2 nemnegatív, a (25.11) összefüggés jobb oldalát ezzel csökkentve az egyenlőtlenség még inkább érvényes lesz, tehát

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq |\langle C\rangle|^2/4, \quad (25.13)$$

vagyis

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq |\langle C\rangle|/2, \quad (25.14)$$

amely az egyenlőtlenség általában használt alakja. Lényeges, hogy az itt szereplő mennyiségek, tehát a szórás, illetve a várható értékek függenek attól az állapottól, amelyre vonatkozóan kiszámítjuk ezeket, de az egyenlőtlenség tetszőleges olyan állapotban érvényes, amelyekre az A , B és C értelmezve vannak. Az egyenlőtlenség (25.14) alakját tetszőleges operátorokra először Robertson írta föl.

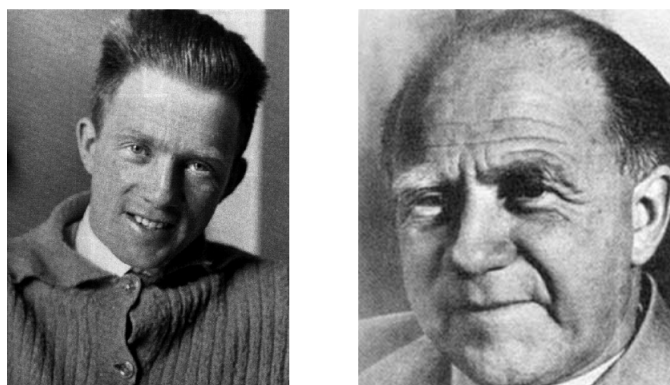
Speciálisan, az $A = X$, $B = P$ operátorok esetére $[X, P] = i\hbar$ miatt az egyenlőtlenség alakja

$$(\Delta X)(\Delta P) \geq \hbar/2, \quad (25.15)$$

amelyet, Heisenberg-egyenlőtlenségnek, illetve néha *bizonytalansági (határozatlansági) relációnak* szokás nevezni.

Az egyenlőtlenségek ezen alakjai statisztikus jelentésűek, a szórásokat illetve a várható értékeket egy adott állapoton elvégzett sok mérésből lehet kiszámítani, és az egyenlőtlenség ezekre vonatkozik. Ebben az értelemben a (25.15) egyenlőtlenséget először Schrödinger írta föl. Heisenberg-től egy más fizikai jelentésű egyenlőtlenség származik, amelyet ő az ún. gamma-mikroszkópja kapcsán mutatott be. Eszerint egyetlen helymérés során az impulzus megváltozik és fordítva, úgy, hogy egyetlen mérésben az elvi bizonytalanságok szorzata nagyobb mint $\hbar$. Ennek ellenére hagyományosan az (25.15) egyenlőtlenséget szokták Heisenberg-egyenlőtlenségnek nevezni.

Werner Heisenberg (1901-1976)



56. ábra.

Vizsgáljuk meg, hogy melyek azok a speciális $|\psi_0\rangle$ állapotok, amelyekre

$$(\Delta A)_{\psi_0}(\Delta B)_{\psi_0} = |\langle C \rangle_{\psi_0}|/2, \quad (25.16)$$

azaz amelyekre a szórások szorzata a megfelelő operátorok fölcserélhetetlenségéből következően a lehető legkisebb. Ezekre az állapotokra egyrészt a kiinduló Cauchy-Schwartz-egyenlőtlenségben egyenlőségnek kell állnia, azaz a $|\varphi\rangle = \lambda |\chi\rangle$ -ből következő

$$(A - \langle A \rangle) |\psi_0\rangle = \lambda (B - \langle B \rangle) |\psi_0\rangle \quad (25.17)$$

egyenletnek kell teljesülnie. Más szóval a két operátor a *kérdéses állapot*on csak egy konstansszorosban különbözhet egymástól. Az egyenlőséghez emellett még az is szükséges, hogy σ_{AB} eltűnjék a (25.11) szerint.

Számítsuk ki az ezekhez az állapotokhoz tartozó $\langle \varphi | \chi \rangle$ illetve $\langle \chi | \varphi \rangle$ belső szorzatokat:

$$\langle \psi_0 | (A - \langle A \rangle) (B - \langle B \rangle) \psi_0 \rangle = (\Delta A)^2 / \lambda, \quad (25.18)$$

$$\langle \psi_0 | (B - \langle B \rangle) (A - \langle A \rangle) \psi_0 \rangle = \lambda (\Delta B)^2. \quad (25.19)$$

Itt a bal oldalak összege $2\sigma_{AB}$ különbsége $i \langle C \rangle$ ezért ugyanez áll a jobb oldalakra is. A keresett $|\psi_0\rangle$ állapotban, melyben $\sigma_{AB} = 0$, tehát

$$(\Delta A)^2 / \lambda + \lambda (\Delta B)^2 = 0, \quad (25.20)$$

$$(\Delta A)^2 / \lambda - \lambda (\Delta B)^2 = i \langle C \rangle, \quad (25.21)$$

amiből $\lambda = \frac{2(\Delta A)^2}{i\langle C \rangle} = \frac{-i\langle C \rangle}{2(\Delta B)^2}$. Tehát a keresett állapotokon, azokon amelyeken (25.14) egyenlőségbe megy át érvényes, hogy $(A - \langle A \rangle) |\psi_0\rangle = \lambda(B - \langle B \rangle) |\psi_0\rangle$, a fönti λ -val. Ezeket *intelligens állapotoknak* szokás nevezni.

Például, ha $A = X$, és $B = P_x$ egy egydimenziós mozgás esetén, akkor koordinátareprezentációban

$$(x - \langle X \rangle) \psi_0(x) = \frac{2(\Delta X)^2}{i\hbar} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \langle P_x \rangle \right) \psi_0(x). \quad (25.22)$$

Ennek a differenciálegyenletnek a normált megoldása:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi(\Delta X)^2}} \exp \left\{ -\frac{(x - \langle X \rangle)^2}{4(\Delta X)^2} + i \langle P_x \rangle x / \hbar \right\}. \quad (25.23)$$

Ez a minimális határozatlanságú hullámcsomag, amelynek abszolútérték-négyzetét, (azaz a koordináta, mint valószínűségi változó valószínűségi sűrűségfüggvényét) Gauss-eloszlásnak vagy másnéven *normális eloszlásnak* nevezzük. A közvetlen számítás is egyszerűen mutatja, hogy ebben az állapotban a koordináta várható értéke éppen $\langle X \rangle$, az impulzusé $\langle P_x \rangle$, a koordináta szórása éppen ΔX , az impulzusé pedig $\Delta P_x = \hbar/2(\Delta X)$.

25.1 Feladat: Oldjuk meg a (25.22) differenciálegyenletet.

25.2 Feladat: Keresük meg ψ_0 -t impulzusreprezentációban úgy, hogy a megfelelő egyenletet impulzusreprezentációban oldjuk meg.

Keressük meg $\psi_0(x)$ Fourier-transzformáltját.

26. Időfejlődés, Schrödinger-egyenlet, kontinuitási egyenlet

26.1. A Schrödinger-egyenlet általános tulajdonságai

A Schrödinger-egyenlet alakja:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = H |\Psi(t)\rangle, \quad (26.1)$$

ahol $|\Psi(t)\rangle$ a rendszer időtől függő állapotát megadó vektor.

Az egyenlet egyik fontos tulajdonsága, hogy lineáris. Ez azt jelenti, hogy ha $|\Psi_1\rangle$ és $|\Psi_2\rangle$ megoldás, akkor megoldás a $c_1 |\Psi_1\rangle + c_2 |\Psi_2\rangle$ vektor is, ahol c_1 és c_2 komplex állandók. Az összeg végtelen sok tagra is kiterjeszthető. A linearitás azért teljesül, mert az idő szerinti deriválás lineáris, illetve a másik oldalon a Hamilton-operátor is lineáris, azaz tagonként alkalmazható. További lényeges tulajdonság, hogy az egyenlet időben elsőrendű, tehát megadva egy $|\Psi(t_0)\rangle$ kezdeti föltételt, a későbbi időpontokban az állapot elvileg meghatározható. Erre vonatkozóan alább látunk majd egy módszert. A linearitással kapcsolatban itt megemlítjük, hogy természetesen a fönt említett több különböző megoldás különböző kezdeti föltételekhez tartozik. Egy további tulajdonság, hogy az egyenlet megőrzi az állapot $\langle \Psi | \Psi \rangle$ normáját. Ezt a normát – mint tudjuk – a valószínűségi értelmezés miatt 1-nek szoktuk választani. A bizonyításhoz deriváljuk a normát idő szerint, használjuk a Schrödinger-egyenletet, továbbá azt, hogy a H önadjungált:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi | \Psi \rangle &= \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} | \Psi(t) \right\rangle + \left\langle \Psi(t) | \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle = \\ &= \left\langle \frac{1}{i\hbar} H \Psi | \Psi(t) \right\rangle + \left\langle \Psi(t) | \frac{1}{i\hbar} H \Psi \right\rangle = \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \langle H \Psi | \Psi(t) \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi(t) | H \Psi \rangle = 0. \end{aligned} \quad (26.2)$$

Mivel a derivált 0, a $\langle \Psi | \Psi \rangle$ állandó, s így, ha kezdetben 1 volt, akkor a továbbiakban is 1 marad.

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1. \quad (26.3)$$

A Schrödinger-egyenlet fönti tulajdonságai miatt bevezethető egy lineáris operátor, amely a $t = t_0$ időpillanatban vett $|\Psi(t_0)\rangle$ -hoz hozzárendeli a t időbeli $|\Psi(t)\rangle$ -t. Ennek az úgynevezett *evolúciós operátornak* a definíciója így

$$U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle = |\Psi(t)\rangle, \quad (26.4)$$

amely a (26.3) szerint azzal a tulajdonsággal is bír, hogy

$$\langle U(t, t_0) \Psi(t_0) | U(t, t_0) \Psi(t_0) \rangle = \langle \Psi(t_0) | \Psi(t_0) \rangle = 1. \quad (26.5)$$

Ha ez minden $\Psi(t_0)$ -ra fönnáll, akkor abból következik, hogy $U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = U(t, t_0)U^\dagger(t, t_0) = 1$, s az ilyen tulajdonságú operátort *unitérnek* nevezzük.

Tekintsünk egy $V(\mathbf{r})$ potenciáltérben mozgó részecskét, melynek Hamilton-operátora

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{r}). \quad (26.6)$$

A Schrödinger-egyenlet alakja így:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \left(\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) |\Psi(t)\rangle. \quad (26.7)$$

Írjuk ezt most koordinátareprezentációba:

$$i\hbar \langle \mathbf{r} | \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \langle \mathbf{r} | \left(\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) |\Psi(t)\rangle, \quad (26.8)$$

azaz

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (26.9)$$

Ez utóbbi egyenletet írta föl lényegében Schrödinger és ennek speciális stacionárius megoldásait használta sajátérték-egyenletként, amiről később esik majd szó.

26.2. Kontinuitási egyenlet

Most a koordinátareprezentációba írt (26.9) Schrödinger-egyenlet egy következményét fogjuk levezetni, amelyet *kontinuitási egyenletnek* nevezünk. Szorozzuk a (26.9) egyenletet $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$ -vel, a komplex konjugált egyenletet pedig $\Psi(\mathbf{r}, t)$ -vel és vonjuk ki az előbbiből az utóbbit:

$$i\hbar \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*), \quad (26.10)$$

ahol kihasználtuk, hogy a V valós, tehát a $V(\mathbf{r})\Psi\Psi^*$ tagok kiejtik egymást. Az utóbbi egyenletet az

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \quad (26.11)$$

alakba is írhatjuk, azaz

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + \frac{\hbar}{2mi} \nabla (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = 0. \quad (26.12)$$

A $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \rho(\mathbf{r}, t)$ a részecske térbeli megtalálásának valószínűsége, a

$$\frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) := \mathbf{j} \quad (26.13)$$

vektort pedig *valószínűségi áramsűrűség vektornak* nevezzük. A (26.12) alapján fönnáll a

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{r},t) + \nabla \mathbf{j} = 0 \quad (26.14)$$

kontinuitási egyenletnek nevezett összefüggés, amely formailag teljesen analóg a folyadékok mechanikájának illetve az elektrodinamikának a kontinuitási egyenletével, melyek a tömeg, illetve a töltés megmaradását fejezik ki. A (26.14) kvantummechanikai változat a ρ és $\mathbf{j}$ értelmezése szerint a részecske megtalálási valószínűségének *lokális* megmaradását fejezi ki. Ezt a szokásos módon integrális alakban is megfogalmazhatjuk. Egy rögzített térfogatra integrálva, a Gauss-tétel alkalmazásával kapjuk, hogy

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}} \rho(\mathbf{r},t) = - \oint_{\mathcal{F}} \mathbf{j} \cdot d\mathbf{f}. \quad (26.15)$$

A bal oldalon a részecske $\mathcal{V}$ térfogaton belüli megtalálási valószínűségének időbeli változása áll, míg a jobb oldalon az a valószínűségi áram, ami "befolyik" a térfogatba a zárt $\mathcal{F}$ felületen át (az $\mathbf{n}$ vektor a felületből kifelé mutat). Ez indokolja $\mathbf{j}$ elnevezésének jogosságát. Azaz, ha valahol változik a megtalálási valószínűség, az azzal jár, hogy a szomszédos helyeken is változik, éspedig úgy, hogy a nettó változás eltűnik.

27. A várható értékek időfejlődése, Ehrenfest tétele

Vizsgáljuk az A önadjungált operátor által reprezentált fizikai mennyiség

$$\langle \Psi(t) | A \Psi(t) \rangle \equiv \langle A \rangle \quad (27.1)$$

várható értékének időfejlődését a $|\Psi(t)\rangle$ állapotban. Idő szerinti differenciálással és a Schrödinger-egyenlet fölhasználásával nyerjük, hogy

$$\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle. \quad (27.2)$$

Speciálisan az $\mathbf{R}$ és $\mathbf{P}$ operátorokra alkalmazva a fönti összefüggést egy $H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R})$ Hamilton-operátor esetén kapjuk, hogy

$$\frac{\partial \langle \mathbf{R} \rangle}{\partial t} = \frac{\langle \mathbf{P} \rangle}{m}, \quad (27.3)$$

$$\frac{\partial \langle \mathbf{P} \rangle}{\partial t} = - \langle \nabla V(\mathbf{R}) \rangle. \quad (27.4)$$

A (27.3 és 27.4) összefüggésekben a kommutátornak a 22.3 feladatban bizonyított deriváló tulajdonságát használtuk. Ez utóbbiakat, melyek a klasszikus mozgásegyenlet kvantumos megfelelői, nevezzük *Ehrenfest tételeinek*.

Hasonlóságok és különbségek a klasszikus mozgásegyenlettel: Vizsgáljuk meg most, hogy milyen értelemben felelnek ezek meg a klasszikus mozgásegyenletnek egy $\Psi(\mathbf{r},t)$ hullámfüggvénnyel jellemzett részecske esetén. Az $\langle \mathbf{R} \rangle_t$ várható érték három, már csak az időparamétertől függő számot jelent, ez egy durva jellemzője a mozgásának, mert ez csupán a $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2$ valószínűségi sűrűség "súlypontja". Fölvetődik a kérdés, hogy ez a súlypont úgy mozog-e mint a megfelelő klasszikus mechanikai probléma esetén maga a részecske. Ez akkor lenne így, ha (27.4) jobb oldalán az $\mathbf{F}_{cl}$ klasszikus erőnek a súlypont helyén vett értéke állana, azaz, ha érvényes lenne, hogy $\mathbf{F}_{cl}(r = \langle \mathbf{R} \rangle) = -\nabla V(r = \langle \mathbf{R} \rangle)$. Azonban a jobb oldalon

$$- \langle \nabla V(\mathbf{R}) \rangle \neq -\nabla V(r = \langle \mathbf{R} \rangle) \quad (27.5)$$

áll, mert egy függvény várható értéke általában nem egyenlő a függvény értékével a változó várható értékének helyén. Ezért a $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ súlypontja nem úgy mozog, ahogyan a megfelelő klasszikus részecske az adott potenciálban. Meg lehet mutatni, hogy kivételt ez alól azok az esetek jelentenek, amikor a V potenciál legfőljebb kvadratikus függvénye a koordinátának, azaz az erőmentes részecske, az állandó erő hatása alatt mozgó részecske, és a koordináta négyzetétől függő potenciális energia esetén, amely ha vonzó, akkor éppen a harmonikus rezgésnek felel meg. Az említett kivételes eseteken kívül viszont (27.5)-ben nincs egyenlőség.

Tekintsünk azonban egy olyan $\Psi(\mathbf{r}, t)$ állapotot, amely igen jól lokalizált. Ez alatt azt értjük, hogy azon a tartományon ahol $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ különbözik nullától a $\nabla V(\mathbf{r})$, vagyis az erő, lényegében állandó. Ekkor koordinátareprezentációban számolva közelítőleg érvényes, hogy

$$\begin{aligned}\langle \nabla V(\mathbf{R}) \rangle &= \int d^3r \Psi^*(\mathbf{r}, t) [\nabla V(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 [\nabla V(\mathbf{r})] \approx \\ &\approx \nabla V(\mathbf{r} = \langle \mathbf{R} \rangle) \int d^3r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \nabla V(\mathbf{r} = \langle \mathbf{R} \rangle)\end{aligned}\quad (27.6)$$

mert $\nabla V(\mathbf{r})$, közel állandó lévén, kivihető az integráljel elé az $\mathbf{r} = \langle \mathbf{R} \rangle$ helyen vett értékével, ahol a $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ lokalizálva van. Ebben az esetben tehát a $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ súlypontja közelítőleg úgy mozog, mint a megfelelő erő hatása alatt mozgó klasszikus részecske. Ez felel meg a klasszikus határesetnek.

28. Az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldása konzervatív rendszerekre.

Tegyük föl, hogy az

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = H |\Psi\rangle \quad (28.1)$$

Schrödinger-egyenletben H nem függ az időtől. Keressük ennek az egyenletnek a megoldását a H sajátvektorai

$$H |u_{m,i}\rangle = \varepsilon_m |u_{m,i}\rangle \quad (28.2)$$

szerinti sorfejtés alakjában:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{m,i} c_m^i(t) |u_{m,i}\rangle, \quad (28.3)$$

ahol föltételeztük azt, hogy H spektruma diszkrét. Itt a $c_m^i(t)$ együtthatók az idő függvényei, és az $|u_{m,i}\rangle$ rendszer az időtől független ortonormált bázis a térben. Az utóbbi tulajdonságot a H önadjungált volta biztosítja. Írjuk be ezt a sorfejtést (28.1)-be, kapjuk, hogy

$$i\hbar \sum_{m,i} \frac{\partial}{\partial t} c_m^i(t) |u_{m,i}\rangle = H \sum_{m,i} c_m^i(t) |u_{m,i}\rangle = \sum_{m,i} c_m^i(t) \varepsilon_m |u_{m,i}\rangle. \quad (28.4)$$

Szorozzuk meg az egyenletet skalárisan $|u_{n,k}\rangle$ -vel, és használjuk ki az $|u_{m,i}\rangle$ rendszer ortonormált voltát. Kapjuk, hogy

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_n^k(t) = c_n^k(t) \varepsilon_n, \quad (28.5)$$

amelynek megoldása $c_n^k(t) = c_n^k(t_0) e^{-i\varepsilon_n(t-t_0)/\hbar}$, ahol a $c_n^k(t_0)$ -k az együtthatók a t_0 időpillanatban. Ezek szerint a megoldás:

$$\Psi(t) = \sum_{n,k} c_n^k(t_0) e^{-i\varepsilon_n(t-t_0)/\hbar} |u_{n,k}\rangle. \quad (28.6)$$

Ezek szerint a Schrödinger-egyenlet megoldásának egyik lehetséges módja, ha megkeressük H sajátértékeit és sajátvektorait, mert ezek segítségével a megoldás a fönti sor segítségével előállítható.

A $c_n^k(t_0)$ kezdeti kifejtési együtthatókat a keresett megoldás kezdeti értéke szabja meg, amelyet egy konkrét megoldás fölírásához meg kell adnunk. Legyen ez $|\Psi(t_0)\rangle$, akkor

$$|\Psi(t_0)\rangle = \sum_{n,k} c_n^k(t_0) |u_{n,k}\rangle, \quad (28.7)$$

amiből

$$c_n^k(t_0) = \langle u_{n,k} | \Psi(t_0) \rangle. \quad (28.8)$$

Így egy adott kezdeti $|\Psi(t_0)\rangle$ -hoz tartozó megoldás:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n,k} e^{-i\varepsilon_n(t-t_0)/\hbar} |u_{n,k}\rangle \langle u_{n,k} | \Psi(t_0) \rangle. \quad (28.9)$$

A t_0 kezdeti időpillanatot egyébként rendszerint 0-nak szoktuk választani.

Ha a H spektruma folytonos, akkor hasonló megfontolással a

$$\Psi(t) = \int \sum_{k=1}^{g\varepsilon} e^{-i\varepsilon(t-t_0)/\hbar} |u_{\varepsilon,k}\rangle \langle u_{\varepsilon,k} | \Psi(t_0) \rangle d\varepsilon \quad (28.10)$$

eredmény adódik, ahol föltételeztük, hogy a folytonos spektrumba eső ε sajátérték degenerációja diszkrét: g_ε -szoros.

Stacionárius állapotok: A föntiek alapján egy olyan állapotnak, amely H sajátállapota az időfejlődése triviális:

$$|u_{n,k}\rangle e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}. \quad (28.11)$$

Ezért azokat az időfüggő állapotokat amelyek H egy adott sajátértékéhez tartoznak *stacionárius állapotoknak* nevezzük. Szokásos ez az elnevezés magukra az időfüggetlen $|u_{n,k}\rangle$ sajátállapotokra is. Nyilván bármely adott energiasajátértékhez tartozó degenerált sajátállapotok

$$\left(\sum_{k=1}^{g\varepsilon} c_k |u_{n,k}\rangle \right) e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} \quad (28.12)$$

lineáris kombinációja – összegzés csak a k degenerációs indexre történik – is stacionárius. A stacionárius állapotok minden időpillanatban H sajátállapotai a $H |u_{n,k}\rangle e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} = \varepsilon_n |u_{n,k}\rangle e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}$ képletnek megfelelően ugyanazzal az ε_n sajátértékkel. Ez a Bohr-féle első posztulátum kvantummechanikai magyarázata.

29. Mozgásállandók, Bohr-frekvenciák

29.1. Mozgásállandók

Mozgásállandónak nevezünk egy fizikai mennyiséget, amely nem függ explicite az időtől, és amely fölcserélhető a H Hamilton-operátorral:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = 0, \quad (29.1)$$

$$[A, H] = 0. \quad (29.2)$$

Konzervatív rendszerre láthatólag maga H is mozgásállandó. Érvényesek továbbá a következő tételek:

(i) Mozgásállandó várható értéke tetszőleges állapotban állandó

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi | A | \Psi \rangle = 0, \quad (29.3)$$

ez következik a mozgásállandó fönti definíciójából és a (27.2) összefüggésből.

(ii) Ha A mozgásállandó, akkor *vannak* a rendszernek olyan *stacionárius* állapotai, amelyek minden időpillanatban A ugyanazon sajátértékéhez tartoznak. Ez utóbbiak az ún. “jó kvantumszámok”.

Mivel A és H fölcserélhető, van olyan $|u_{n,i,l}\rangle$ bázis, amelyben mindkét operátor diagonális azaz

$$H|u_{n,i,l}\rangle = \varepsilon_n |u_{n,i,l}\rangle, \quad (29.4)$$

$$A|u_{n,i,l}\rangle = \alpha_i |u_{n,i,l}\rangle. \quad (29.5)$$

Itt l egy olyan index, amely egy lehetséges további degenerációt jelez, amennyiben A és H nem CSCO. Mivel az $|u_{n,i,l}\rangle$ -ek (29.4) szerint stacionárius állapotok, ezért időben (28.11) alapján $|u_{n,i,l}\rangle e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}$ szerint változnak. Emiatt pedig minden későbbi időpillanatban is sajátvektorai A -nak ugyanazzal az α_i sajátértékkel, hiszen $A|u_{n,i,l}\rangle e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} = \alpha_i e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} |u_{n,i,l}\rangle$. Ezért nevezzük az α_i sajátértékeket jó kvantumszámmak.

(iii) Annak a valószínűsége, hogy A mérésekor a $|\Psi(t)\rangle$ állapotban az α_i sajátértéket találjuk, nem függ az időtől. Ez a valószínűség a 4. posztulátum szerint $\mathcal{P}(\alpha_i) = \sum_{n,l} |c_{n,i,l}(t)|^2$, ahol $c_{n,i,l}(t) = \langle u_{n,i,l} | \Psi(t) \rangle = c_{n,i,l}(0) e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}$, ahol most a t_0 kezdeti időpontot 0-nak választottuk. Mivel $|c_{n,i,l}(t)|^2 = |c_{n,i,l}(0)|^2$, ezért a $\mathcal{P}(\alpha_i)$ valóban időtől független.

29.2. Bohr-frekvenciák és a kiválasztási szabályok eredete

Legyen most D egy tetszőleges önadjungált operátor, amely általában nem cserélhető föl a H -val. Vizsgáljuk meg, hogyan változik D várható értéke egy konzervatív rendszerben. Mivel itt $|\Psi(t)\rangle = \sum_{n,k} c_n^k(t) e^{-i\varepsilon_n(t-t_0)/\hbar} |u_{n,k}\rangle$, a $\langle \Psi(t) | D | \Psi(t) \rangle$ várható értéket ki tudjuk írni. $t_0 = 0$ esetben

$$\begin{aligned} \langle \Psi(t) | D | \Psi(t) \rangle &= \sum_{n',k'} \sum_{n,k} c_{n'}^{k'*}(0) e^{+i\varepsilon_{n'} t/\hbar} c_n^k(0) e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} \langle u_{n',k'} | D | u_{n,k} \rangle = \\ &= \sum_{n',k'} \sum_{n,k} c_{n'}^{k'*}(0) c_n^k(0) e^{+i(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n)t/\hbar} \langle u_{n',k'} | D | u_{n,k} \rangle. \end{aligned} \quad (29.6)$$

Tegyük föl most, hogy D nem függ explicit az időtől, az $\langle u_{n',k'} | D | u_{n,k} \rangle$ mátrixelemek tehát állandók. A (29.6) formula mutatja, hogy a $\langle D \rangle$ időfüggését $(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n)/\hbar = \omega_{n'n}$ körfrekvenciával, azaz $(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n)/\hbar = \nu_{n'n}$ frekvenciával oszcilláló tagok összege adja, ezeket nevezzük *Bohr-frekvenciáknak*. A legfontosabb példa erre, amikor a D mennyiség éppen egy atomi rendszer elektromos dipólusmomentuma, melynek várható értéke tehát a különböző Bohr-frekvenciákkal oszcillál. A rezgő dipólusmomentum – az elektrodinamikából ismert módon – viszont éppen ilyen diszkrét frekvenciájú elektromágneses hullámokat bocsát ki, és ezek spektrumát mérjük a spektroszkópiában. Ez az összefüggés alapozza meg tehát mélyebben a második Bohr-féle posztulátumot, vagyis, hogy az atomi rendszer spektrumában a stacionárius állapotokhoz tartozó energiakülönbségek és a h Planck-állandó hányadosa által meghatározott frekvenciákat látunk.

A $\langle \psi(t) | D | \psi(t) \rangle$ várható értékben azonban csak azok a frekvenciák jelennek meg, amelyekre az $\langle u_{n',k'} | D | u_{n,k} \rangle$ mátrixelemek nem tűnnek el. A H -tól és D -tól függően sok esetben egyszerű szabályok adhatók arra nézve, hogy melyek ezek a nem eltűnő mátrixelemek. A nem eltűnő mátrixelemek tehát kiválasztják azokat a frekvenciákat, amelyek ténylegesen megjelennek. Ezért azokat a szabályokat, amelyek megadják, hogy melyek a nem eltűnő mátrixelemek, *kiválasztási szabályoknak* nevezzük. Ezeket a szabályokat – sőt részben magukat a mátrixelemeket is – általában szimmetria megfontolások alapján lehet megtalálni.

30. A szabad részecske kvantummechanikai tárgyalása

A szabad részecske Schrödinger-egyenlete egydimenzióban:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{P^2}{2m} \Psi. \quad (30.1)$$

A stacionárius állapotok a $\frac{P^2}{2m}$ sajátvektorai, ezek pedig azonosak P sajátvektoraival, azaz a $P|p\rangle = p|p\rangle$, ahol p bármilyen valós érték lehet. Ez utóbbiak a de Broglie-hullámok koordinátareprezentációban. A $p^2/2m$ energiasajátértékek kétszeresen degeneráltak, a p és a $-p$ impulzusú állapot ugyanahhoz az energiasajátértékhez tartozik. Az általános időfüggő megoldás:

$$|\Psi(t)\rangle = \int |p\rangle \langle p| \Psi(0)\rangle e^{-ip^2 t/2m\hbar} dp, \quad (30.2)$$

itt $\langle p| \Psi(0)\rangle =: \tilde{\psi}_0(p)$ a kezdeti állapot impulzusreprezentációban. Ebből

$$\begin{aligned} \langle p'| \Psi(t)\rangle &= \tilde{\Psi}(p', t) = \int \langle p'| p\rangle \langle p| \Psi(0)\rangle e^{-ip^2 t/2m\hbar} dp = \\ &= \int \delta(p' - p) \tilde{\psi}_0(p) e^{-ip^2 t/2m\hbar} dp = \tilde{\psi}_0(p') e^{-ip'^2 t/2m\hbar}, \end{aligned} \quad (30.3)$$

azaz a megoldás impulzusreprezentációban p' helyett p -t írva:

$$\tilde{\Psi}(p, t) = \tilde{\psi}_0(p) e^{-ip^2 t/2m\hbar}. \quad (30.4)$$

Koordinátareprezentációban az eredmény ennek a Fourier-transzformáltja:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\psi}_0(p) e^{-ip^2 t/2m\hbar} e^{ipx/\hbar} dp, \quad (30.5)$$

amint ezt már korábban is láttuk. Ha a kezdeti állapotban a $\psi_0(x)$ koordináta-hullámfüggvény adott, akkor ebből $\tilde{\psi}_0(p)$ a

$$\tilde{\psi}_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi_0(x) e^{-ipx/\hbar} dx \quad (30.6)$$

inverz Fourier-transzformációval adódik. Majd ennek ismeretében a (30.5) alapján lehet meghatározni $\Psi(x, t)$ -t, ez utóbbi is egy Fourier-transzformáció.

Közvetlenül koordinátareprezentációban is megoldhatjuk a problémát. Az energiasajátérték-egyenlet ebben az esetben:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} = \varepsilon u. \quad (30.7)$$

Ennek megoldásai $\varepsilon < 0$ esetben a plusz vagy a mínusz végtelenben exponenciálisan divergáló függvényt adnak, amelyekből szuperpozícióval sem lehet négyzetesen integrálható megoldást kapni. Az $\varepsilon \geq 0$ esetben viszont – noha maguk a megoldások nem tartoznak L^2 -be – azokból szuperpozícióval már fizikailag elfogadható megoldást kapunk. Ebben az esetben a (30.7) másodrendű egyenlet két lineárisan független megoldása közül a következő párokat szokás választani:

$$e^{ikx}, \quad e^{-ikx}, \quad (30.8)$$

$$\cos kx, \quad \sin kx, \quad (30.9)$$

ahol $k = \sqrt{2m\varepsilon/\hbar^2} > 0$, azaz egy adott $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ energiasajátérték kétszeresen degenerált. Az e^{ikx} , e^{-ikx} párról könnyen látható, illetve ismert, hogy ezek az impulzus sajátfüggvényei is, $p_+ = \hbar k$ illetve $p_- = -\hbar k$ sajátértékekkel, melyek a fentebb említett – adott energiához tartozó – két degenerált de Broglie-hullámmal azonosak. Az általános megoldás az előző fejezet receptje szerint

$$\int_0^\infty (c_+(\varepsilon) e^{ikx} + c_-(\varepsilon) e^{-ikx}) e^{-i\varepsilon t/\hbar} d\varepsilon. \quad (30.10)$$

Ez átírható k szerinti integrálok összegévé

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \tilde{c}_+(k) e^{ikx} e^{-i\frac{\hbar k^2 t}{2m}} \frac{\hbar^2 k}{m} dk - \int_0^{-\infty} \tilde{c}_-(-k) e^{ikx} e^{-i\frac{\hbar k^2 t}{2m}} \frac{\hbar^2 k}{m} dk = \\ = \int_{-\infty}^\infty f(k) e^{ikx} e^{-i\frac{\hbar k^2 t}{2m}} dk, \end{aligned} \quad (30.11)$$

ahol

$$\tilde{c}_\pm(k) = c_\pm(\hbar^2 k^2 / 2m) \quad \text{és} \quad f(k) = \begin{cases} \tilde{c}_+(k) \frac{\hbar^2 k}{m} & \text{ha } k > 0, \\ \tilde{c}_-(-k) \frac{\hbar^2 k}{m} & \text{ha } k < 0. \end{cases}$$

Vagy a $\hbar k = p$ jelöléssel és $\frac{\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} f(p/\hbar) = \tilde{\psi}_0(p)$ -vel visszkapjuk az előző (30.5) formulát.

30.1 Feladat: Milyen operátor sajátértékei tesznek különbséget a $\cos kx$ és a $\sin kx$ energiasaját-függvények között?

Ha nem akarjuk az állapot időfejlődését explicite is megadni, hanem megelégszünk az X és P várható értékének és szórásának meghatározásával, akkor az Ehrenfest-tételek ismételt alkalmazásával ez igen tanulságosan megtehető. A $H = \frac{P^2}{2m}$ és a (27.3) és (27.4) alapján:

$$\frac{d\langle X \rangle}{dt} = \frac{\langle P \rangle}{m}, \quad \frac{d\langle P \rangle}{dt} = 0, \quad \langle P \rangle = p_0. \quad (30.12)$$

Ebből látható hogy egy kezdetben $\langle X \rangle_0 = x_0$ koordináta, illetve $\langle P \rangle_0 = p_0$ impulzus várható értékkel bíró állapot fejlődése során az impulzus várható értéke nem változik, a koordináta várható értéke pedig az idő múlásával a klasszikus esetnek megfelelően az $\langle X \rangle = x_0 + \frac{p_0}{m}t$ képletnek megfelelően $\frac{p_0}{m}$ egyenletes sebességgel halad. Az impulzus szórása sem változik, mivel:

$$\frac{d(\Delta P)^2}{dt} = \frac{d\langle P^2 \rangle}{dt} - \frac{d\langle P \rangle^2}{dt} = 0, \quad (30.13)$$

s így $(\Delta P)^2 = \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2$ állandó.

Most megmutatjuk, hogy a koordináta szórása viszont nő, (az állapot hullámfüggvénye szétfolyik) mert a fázissebesség p -függő: ez olyan mint egy diszperzív – azaz frekvenciafüggő törésmutatóval bíró – közegben terjedő elektromágneses hullám szétfolyása. Deriváljuk idő szerint $(\Delta X)^2$ -et

$$\begin{aligned} \frac{d(\Delta X)^2}{dt} &= \frac{d\langle X^2 \rangle}{dt} - \frac{d\langle X \rangle^2}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [H, X^2] \rangle - 2\langle X \rangle \frac{d\langle X \rangle}{dt} = \\ &= \frac{1}{m} \langle XP + PX \rangle - \frac{2}{m} \langle X \rangle \langle P \rangle = \frac{2\sigma_{PX}}{m}, \end{aligned} \quad (30.14)$$

ahol σ_{PX} a 25. szakaszban bevezetett korrelációs függvény, amely szabad részecske esetén, mint mindjárt látni fogjuk, az időnek lineáris függvénye. Deriváljuk idő szerint még egyszer $(\Delta X)^2$ -et

$$\begin{aligned} \frac{d^2(\Delta X)^2}{dt^2} &= \frac{i}{m\hbar} \langle [H, XP + PX] \rangle - \frac{2}{m^2} \langle P \rangle^2 = \frac{i}{2m^2\hbar} \langle [P^2, XP + PX] \rangle - \frac{2}{m^2} \langle P \rangle^2 = \\ &= \frac{2}{m^2} (\langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2) = \frac{2}{m^2} (\Delta P)^2, \end{aligned} \quad (30.15)$$

mert

$$P^2XP - XPP^2 = P^3X + i\hbar P^2 - XP^3 = -2i\hbar P^2, \quad (30.16)$$

$$P^2PX - PXP^2 = P^3X - XP^3 + i\hbar P^2 = -2i\hbar P^2. \quad (30.17)$$

Mivel $(\Delta P)^2$ (30.13) miatt állandó, (30.15) szerint $\frac{d^2(\Delta X)^2}{dt^2}$ is állandó. Eszerint $\frac{d(\Delta X)^2}{dt}$ s így (30.14) szerint σ_{PX} is az időnek legfőljebb lineáris függvénye, azaz $(\Delta X)^2$ legfőljebb kvadratikus függvény. Vagyis a (30.15) egyenlet egyszerűen integrálható és

$$(\Delta X)^2 = \frac{2}{m^2}(\Delta P)_0^2 \frac{t^2}{2} + 2 \frac{\sigma_{PX}}{m} t + (\Delta X)_0^2. \quad (30.18)$$

Ez a kifejezés a t -nek egy állandó együtthatókkal vett másodfokú kifejezése, azaz parabola. A $(\Delta P)_0^2$ a de Broglie-hullám kivételével minden állapotban pozitív, ezért elegendő idő múlva a $(\Delta X)^2$ az idő négyzetével arányosan nő, azaz a szabad részecskét jellemző állapot szórásnégyzete négyzetesen nő, a hullámcsomag szétfolyik. Pl. intelligens (Gauss alakú) állapotra, amint azt a (25.16) összefüggés kapcsán láttuk, $\sigma_{PX} = 0$, továbbá ebben az esetben $(\Delta P)_0^2 = \frac{\hbar^2}{4(\Delta X)_0^2}$ így erre az állapotra

$$(\Delta X)^2 = (\Delta X)_0^2 \left(1 + \frac{\hbar^2}{4m^2(\Delta X)_0^4} t^2 \right), \quad (30.19)$$

azaz a szétfolyás annál gyorsabb minél kisebb volt $(\Delta X)_0^2$, azaz a kezdeti szélesség, és minél kisebb a részecske tömege. Ezt a formulát szokás a

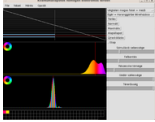
$$(\Delta X) = (\Delta X)_0 \sqrt{1 + \Delta^2} \quad (30.20)$$

alakba is írni, ahol $\Delta = \frac{\hbar}{2m(\Delta X)_0^2} t$. A $\Delta = \sqrt{3}$ érték megadja, hogy m -től és $(\Delta X)_0$ -tól függően mennyi idő alatt nő a lokalizáltság a kétszeresére. Ugyanez az eredmény egy Gauss alakú kezdeti hullámfüggvényre vonatkozóan a (30.6) és a (30.5) összefüggések segítségével az időfüggő hullámfüggvény explicit kiszámításával is megkapható.

30.2 Feladat: Mennyi idő alatt nő a koordináta szórása a kétszeresére egy $m = 0,1$ g-os részecskére, amely kezdetben egy atomi méretre, azaz $(\Delta X)_0 = 10^{-10}$ m hosszúságra van lokalizálva?

30.3 Feladat: Egy alfa részecske mérete klasszikusan kb. 10^{-13} m. Mennyi idő alatt nő ez a lokalizáltság a kétszeresére? Tegyük föl, hogy az alfa részecske a fénysebesség 30-ad részével repül. Mekkora távolságot tesz meg ez alatt az idő alatt, és hogyan viszonyul ez egy atommag méretéhez? Milyen következtetést vonunk le ebből?

30.4 Feladat: Tegyük föl, hogy egy elektron kezdetben egy kb. $r_c = 10^{-15}$ m térrészre van lokalizálva. Ez adódik ha fölteszük, hogy az elektron nyugalmi energiája az általa hordozott töltés elektrosztatikus energiájával egyezik meg, azaz nagyságrendileg $m_e c^2 = (1/4\pi\epsilon_0) q_e^2 / r_c$. Mennyi idő alatt nő kétszeresére ez a lokalizáltság?

KVANTUMÁLLAPOTOK HOMOGENEUS ELEKTROMOS TÉRBEN		
		Ez a java applet egydimenzióban mozgó töltött kvantum részecske dinamikáját mutatja különböző potenciálok és statikus elektromos tér jelenlétében. A további magyarázatokat és beállítási lehetőségeket illetően olvassuk el a „Részletes leírás”-t. RÉSZLETES LEÍRÁS

31. A harmonikus oszcillátor sajátérték-problémája

A következőkben egy algebrai módszerrel oldjuk meg a harmonikus oszcillátor energiasajátérték-problémáját. A harmonikus oszcillátor Hamilton-operátora:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2, \quad (31.1)$$

amelyben az X és P operátorok az $[X, P] = i\hbar$ fölcserélési relációt teljesítik. Vezessük be az

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X + i \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} P \right) \quad (31.2)$$

és

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X - i \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} P \right) \quad (31.3)$$

nem önadjungált és dimenziótlán operátorokat, melyek egymás adjungáltjai. Az $[a, a^\dagger]$ kommutátor kiszámításához az X és P operátorokra vonatkozó fölcserélési relációt alkalmazva az

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (31.4)$$

eredményt kapjuk. Az X és P operátorokat kifejezve a -val és $a^\dagger$ -al, majd ezeket beírva (31.1)-be a Hamilton-operátorra a

$$H = \hbar\omega(a^\dagger a + 1/2) \quad (31.5)$$

kifejezést nyerjük. A H sajátértékeinek és sajátvektorainak meghatározása, azaz a

$$H|\varphi\rangle = \varepsilon|\varphi\rangle \quad (31.6)$$

egyenlet megoldásainak megkeresése az

$$a^\dagger a = N \quad (31.7)$$

operátor sajátállapotainak meghatározásával ekvivalens. N önadjungált és pozitív operátor, tehát sajátértékei csak nemnegatív valós számok lehetnek. Ha ugyanis ν sajátérték, és $|\varphi\rangle$ egy hozzá tartozó sajátvektor: $N|\varphi\rangle = \nu|\varphi\rangle$, akkor $\nu\langle\varphi|\varphi\rangle = \langle\varphi|N\varphi\rangle = \langle\varphi|a^\dagger a\varphi\rangle = \|a\varphi\|^2 \geq 0$. Tehát $\nu\langle\varphi|\varphi\rangle \geq 0$, és mivel $|\varphi\rangle$ nem zéró, hiszen sajátvektor, a normája pozitív, amiből következik, hogy $\nu \geq 0$.

Meg fogjuk most mutatni, hogy N sajátértékei a nemnegatív *egész* számok. Ezek meghatározása céljából szorozzuk az

$$aa^\dagger - a^\dagger a = 1 \quad (31.8)$$

fölcserélési relációt jobbról a -val, illetve balról $a^\dagger$ -al. Kapjuk, hogy $aN - Na = a$, azaz $[N, a] = -a$, illetve $Na^\dagger - a^\dagger N = a^\dagger$, azaz $[N, a^\dagger] = a^\dagger$, vagy átrendezés után:

$$Na = a(N - 1), \quad (31.9)$$

$$Na^\dagger = a^\dagger(N + 1). \quad (31.10)$$

Vizsgáljuk ezután az $a^{\dagger k} a^k$ operátort, ahol $k \geq 1$ egész szám. Teljes indukcióval bebizonyítjuk, hogy

$$a^{\dagger k} a^k = N(N - 1)(N - 2) \dots (N - (k - 1)). \quad (31.11)$$

Az összefüggés $k = 1$ esetén nyilván fönnáll, hiszen az éppen N (31.7) definíciója. Tegyük föl most, hogy (31.11) érvényes k -ra és vizsgáljuk azt $k+1$ -re. Írjuk a vizsgált operátort $a^{\dagger k+1} a^{k+1} = a^\dagger a^{\dagger k} a^k a$ alakba, és használjuk a k -ra igaznak föltett (31.11) összefüggésünket:

$$a^{\dagger k+1} a^{k+1} = a^\dagger a^{\dagger k} a^k a = a^\dagger N(N - 1)(N - 2) \dots (N - (k - 1))a. \quad (31.12)$$

A (31.9) $Na = a(N - 1)$ formula felhasználásával az utolsó helyen álló a -t egyenként sorra átvihetjük az előtte álló faktorok elé, miközben minden tényezőt eggyel csökkentünk. Így :

$$\begin{aligned} a^{\dagger k+1} a^{k+1} &= a^\dagger N(N - 1)(N - 2) \dots a(N - 1 - (k - 1)) = \dots \\ &= a^\dagger Na(N - 2)(N - 3) \dots (N - 1 - (k - 1)) \\ &= a^\dagger a(N - 1)(N - 2) \dots (N - 1 - (k - 1)) = \\ &= N(N - 1)(N - 2) \dots (N - k). \end{aligned} \quad (31.13)$$

Az utolsó sort összehasonlítva (31.11)-el látszik, hogy éppen a bizonyítandó összefüggést kaptuk k helyett $k + 1$ -el, azaz a (31.11) minden $k \geq 1$ egészre érvényes.

Az (31.11) képletből következik, hogy N *spektrumának nem lehet folytonos része*. Ha ugyanis lenne, akkor létezne olyan ν *nem egész* szám és olyan $|\varphi\rangle$ állapot, amelyre $N|\varphi\rangle = \nu|\varphi\rangle$. Erre a $|\varphi\rangle$ állapotra a (31.13) előző összefüggés szerint érvényes, hogy:

$$\langle\varphi|a^{\dagger k}a^k|\varphi\rangle = \nu(\nu - 1)\dots(\nu - (k - 1))\langle\varphi|\varphi\rangle. \quad (31.14)$$

A bal oldal minden $k \geq 1$ -re nemnegatív, mert bármely $|\varphi\rangle$ állapotra $\langle\varphi|a^{\dagger k}a^k|\varphi\rangle = \|a^k\varphi\|^2 \geq 0$. A jobb oldal viszont $\langle\varphi|\varphi\rangle > 0$ miatt negatív lenne egy olyan (értelemszerűen egész) $k \geq 1$ -re, amelyre a $\langle\varphi|\varphi\rangle$ -t szorzó tényezők mindegyike pozitív, kivéve az utolsó $\nu - (k - 1)$ tényezőt, amely negatív, olyan ν és k esetén, amelyre $\nu + 1 < k < \nu + 2$ teljesül. Ez az ellentmondás csak akkor nem lép föl, ha N sajátértékeire kikötjük, hogy azok csak *nemnegatív egész számok* lehetnek. Ekkor ugyanis, ha $\nu = n$ egy egész szám, akkor mind a jobb-, mind a bal oldal pozitív, amíg $k \leq n$, és a jobb oldal eltűnik minden $k \geq n + 1$ -re, s így minden ilyen k -ra fönn kell állnia az $a^k|\varphi\rangle = 0$ összefüggésnek is. Tehát a sajátértékek csak nemnegatív egészek lehetnek.

Tegyük föl most – amit alább a koordinátareprezentáció segítségével meg is mutatunk – hogy létezik legalább egy sajátvektor, amelyhez tartozó sajátérték (az előbbieket szerint szükségképpen) valamilyen nemnegatív egész: $\nu = n$. Ezt a sajátvektort jelöljük $|\varphi_n\rangle$ -el:

$$N|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle. \quad (31.15)$$

A (31.14) szerint erre a vektorra az egyenlőség úgy teljesül, hogy minden $k \geq n + 1$ -re

$$a^k|\varphi_n\rangle = 0, \quad k = n + 1, n + 2, \dots \quad (31.16)$$

Speciális esetként látható, hogy ha $n = 0$ sajátérték, azaz $N|\varphi_{n=0}\rangle = 0|\varphi_0\rangle = 0$, akkor $a|\varphi_0\rangle$ a nulla vektor, mert $\langle a\varphi_0|a\varphi_0\rangle = \langle\varphi_0|a^{\dagger}a\varphi_0\rangle = \langle\varphi_0|N\varphi_0\rangle = 0$, azaz a belső szorzat pozitív definit volta miatt

$$a|\varphi_0\rangle = 0. \quad (31.17)$$

Ez fordítva is érvényes, azaz ha egy vektorra $a|\varphi\rangle = 0$, akkor $|\varphi\rangle$ az N -nek 0 sajátértékhez tartozó sajátvektora. Ez közvetlenül következik, ha az $a^{\dagger}$ -t alkalmazzuk az $a|\varphi\rangle = 0$ összefüggésre. (Itt, ahogyan az szokás, a tér nulla vektorát és a nulla számot nem különböztetjük meg, aminek az az oka, hogy tetszőleges $|\varphi\rangle$ vektorra $0|\varphi\rangle$ a nulla vektor.)

Belátható, hogy ha $|\varphi_n\rangle$ sajátvektor n sajátértékkel, akkor $a^{\dagger}|\varphi_n\rangle$ is sajátvektor $(n + 1)$ sajátértékkel:

$$Na^{\dagger}|\varphi_n\rangle = a^{\dagger}aa^{\dagger}|\varphi_n\rangle = a^{\dagger}(a^{\dagger}a + 1)|\varphi_n\rangle = a^{\dagger}(n + 1)|\varphi_n\rangle = (n + 1)a^{\dagger}|\varphi_n\rangle, \quad (31.18)$$

vagyis

$$Na^{\dagger}|\varphi_n\rangle = (n + 1)a^{\dagger}|\varphi_n\rangle. \quad (31.19)$$

Ez tetszőleges $n \geq 0$ esetén érvényes, mert $a^{\dagger}|\varphi_n\rangle$ biztosan nem a nulla vektor, ugyanis

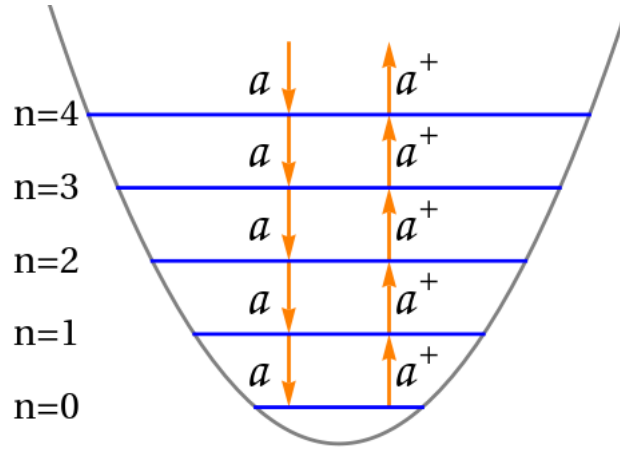
$$\langle a^{\dagger}\varphi_n|a^{\dagger}\varphi_n\rangle = \langle\varphi_n|aa^{\dagger}\varphi_n\rangle = \langle\varphi_n|(1 + a^{\dagger}a)\varphi_n\rangle = (n + 1)\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle > 0, \quad (31.20)$$

hiszen $\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle > 0$, és $n + 1$ is határozottan nagyobb mint 0.

Hasonlóan:

$$Na|\varphi_n\rangle = (n - 1)a|\varphi_n\rangle, \quad (31.21)$$

tehát $a|\varphi_n\rangle$ is sajátvektor $(n - 1)$ sajátértékkel. Ez utóbbi csak $n > 0$ esetén állhat fenn, mert N sajátértékei nemnegatívak.



57. ábra. a és $a^\dagger$ “végiglépegetnek” a sajátállapotokon

A $|\varphi_0\rangle$ -t mint legkisebb n -hez – így (31.5) szerint a legkisebb energiasajátértékhez is – tartozó állapotot *alapállapotnak* szokás nevezni. Az előzőek szerint ezt az állapotot a (31.17) egyértelműen jellemzi, tehát (31.17) -et tekinthetjük az alapállapot definíciójának is, amennyiben megmutatjuk, hogy az $n = 0$ -hoz tartozó sajátvektor, azaz az alapállapot valóban létezik: a hozzá tartozó koordináta-hullámfüggvény négyzetesen integrálható. Bizonyításunkból az is következik majd, hogy az alapállapot nem degenerált. Az alapállapotot definiáló (31.17) $a|\varphi_0\rangle = 0$, azaz

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X + i \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} P \right) |\varphi_0\rangle = 0 \quad (31.22)$$

összefüggés koordinátareprezentációban az

$$\left(\frac{m\omega}{\hbar} x + \frac{d}{dx} \right) \varphi_0(x) = 0 \quad (31.23)$$

differenciálegyenletet adja, amelynek – lévén egy elsőrendű differenciálegyenlet – csak *egyetlen* lineárisan független megoldása létezik:

$$\varphi_0(x) = C e^{-\frac{m\omega}{\hbar} \frac{x^2}{2}}, \quad (31.24)$$

ahol C integrációs állandó. Ez a megoldás valóban négyzetesen integrálható, a normálásból meghatározhatóan $C = (\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{1/4}$. Tehát megmutattuk, hogy az $n = 0$ sajátérték tényleg létezik és nem degenerált.

Most teljes indukcióval megmutatjuk, hogy a többi sajátértékhez is csak egy (lineárisan független) sajátvektor tartozik. Tegyük föl, hogy az állítás igaz n -re, azaz $N|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle$ -ben n nem degenerált. Tudjuk az előzőekből, hogy ekkor létezik az $n + 1$ -hez tartozó sajátvektor is $N|\varphi_{n+1}^i\rangle = (n+1)|\varphi_{n+1}^i\rangle$. Tekintsük most az $a|\varphi_{n+1}^i\rangle$ vektort, ez n -hez tartozó sajátvektora N -nek, és mivel az indukciós hipotézis miatt n nem degenerált, $a|\varphi_{n+1}^i\rangle$ csak egy konstansban különbözhet $|\varphi_n\rangle$ -től, azaz létezik egy olyan c^i szám, amelyre

$$a|\varphi_{n+1}^i\rangle = c^i|\varphi_n\rangle. \quad (31.25)$$

Alkalmazzuk erre az $a^\dagger$ -t, amellyel kapjuk, hogy

$$a^\dagger a|\varphi_{n+1}^i\rangle = c^i a^\dagger|\varphi_n\rangle, \quad (31.26)$$

amiből $a^\dagger a|\varphi_{n+1}^i\rangle = (n+1)|\varphi_{n+1}^i\rangle$ miatt következik, hogy

$$|\varphi_{n+1}^i\rangle = \frac{c^i}{n+1} a^\dagger|\varphi_n\rangle. \quad (31.27)$$

Azt már eddig is tudtuk, hogy $a^\dagger|\varphi_n\rangle$ az $n+1$ -hez tartozó sajátvektora N -nek, most azt látjuk, hogy minden $n+1$ -hez tartozó sajátvektor arányos $a^\dagger|\varphi_n\rangle$ -nel, azaz ezek egymástól mind csak egy konstansban különbözhetnek, vagyis nem degeneráltak. Mivel, mint láttuk, $n=0$ nem degenerált, ezért a teljes indukciót befejeztük. A lineáris harmonikus oszcillátor energia-sajátértékei tehát az

$$\varepsilon_n = \hbar\omega(n + 1/2) \quad (31.28)$$

alakúak, ahol $n = 0, 1, 2, \dots$ a nemnegatív egész számok és ezek nem degeneráltak.

Harmonikus oszcillátor esetén a sajátvektorokra a következő egyszerűsített jelölést szokás használni:

$$|\varphi_n\rangle \equiv |n\rangle. \quad (31.29)$$

Ilyen módon a $|\varphi_n\rangle$ értelmezése szerint, amely az n sajátértékhez tartozó sajátvektor, következik, hogy

$$a^\dagger|n\rangle = c_+|n+1\rangle, \quad a|n\rangle = c_-|n-1\rangle. \quad (31.30)$$

A sajátvektorokat normálnak írva elő: $\langle n|n\rangle = \langle n+1|n+1\rangle = 1$ alapján:

$$|c_+|^2 \langle n+1|n+1\rangle = \langle n|aa^\dagger|n\rangle = \langle n|a^\dagger a + 1|n\rangle = n+1 \quad (31.31)$$

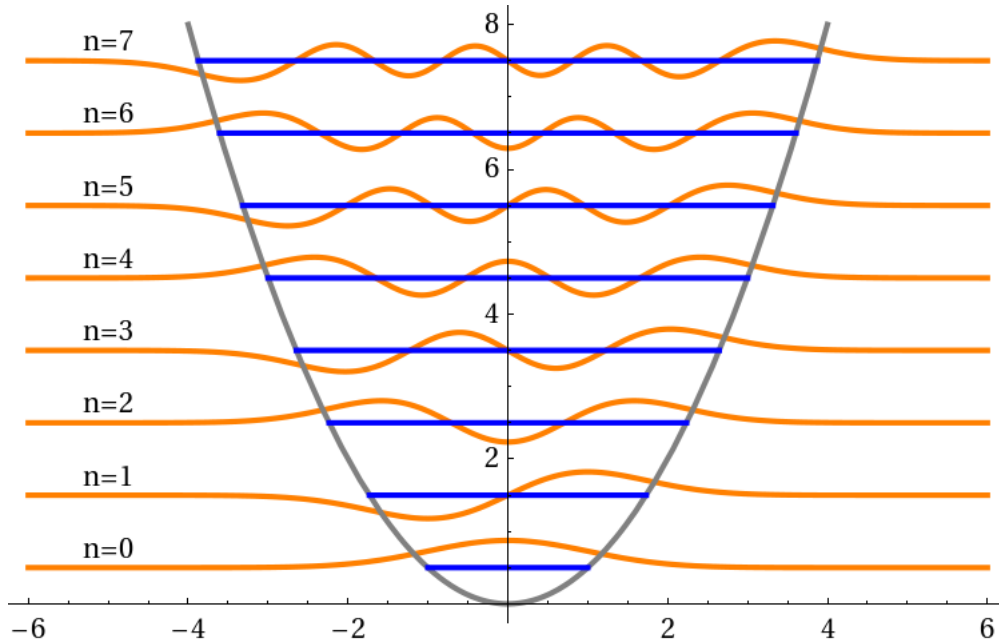
Így konvenció szerint c_+ -t valósnak és pozitívnak választva

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad (31.32)$$

és hasonlóan

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad (31.33)$$

amely $n=0$ esetén éppen az alapállapotot definiáló (31.17) összefüggés.



58. ábra. A harmonikus oszcillátor energiasajátfüggvényei

A normált sajátvektorok ezek szerint előállíthatók $|0\rangle$ -ból az

$$|n\rangle = \left(a^\dagger\right)^n \frac{1}{\sqrt{n!}}|0\rangle \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (31.34)$$

alakban. Meg lehet mutatni, hogy ezek a vektorok valóban teljes rendszert alkotnak, azaz bármely vektor kifejezhető ezek segítségével.

Az operátorok mátrixai a H operátor sajátvektorai által alkotott bázisban: Az $a^\dagger$ operátor eggyel növeli az N sajátértékeit, ezért *keltő*-, az a pedig eggyel csökkenti a sajátértéket, ezért *eltüntető operátornak* szokás nevezni. (Ezek az elnevezések a kvantumelektrodinamikából származnak: az $a^\dagger$ fotont kelt a módusban, míg az a operátor egy fotont tüntet el a módusból.) A különböző $|n\rangle$ -ek ortogonálisak egymásra, mert egy önadjungált operátor – az N – különböző sajátértékeihez tartoznak: $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$. Az $N, a^\dagger, a$, operátorok mátrixai az $|n\rangle$ állapotok által kifeszített bázisban a következők:

$$[N] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \\ 0 & 0 & 2 & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}, \quad (31.35)$$

$$[a^\dagger] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ \vdots & & \sqrt{3} & \ddots \end{pmatrix}, \quad (31.36)$$

a mátrixa pedig az $a^\dagger$ adjungáltja lévén a transzponált mátrix komplex konjugáltja:

$$[a] = \left([a^\dagger]^T \right)^*. \quad (31.37)$$

A (31.2), (31.3) összefüggések alapján így X és P mátrixa is meghatározható. Ezek voltak azok a mátrixok, amelyeket Heisenberg a harmonikus oszcillátor kvantumos vizsgálata során 1925-ben elsőként megtalált, s ez volt a modern kvantummechanika *mátrixmechanikának* nevezett változatának első eredménye.

31.1 Feladat: Mutassuk meg, hogy a koordináta- és az impulzus szórása az alapállapotban:

$$(\Delta X)_0^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad (\Delta P)_0^2 = \frac{m\omega\hbar}{2}.$$

31.2 Feladat: Számítsuk ki az X és P várható értékét és szórását az $|n\rangle$ stacionárius állapotban.

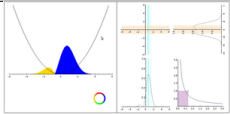
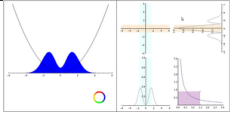
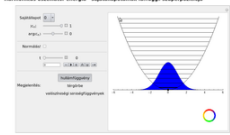
32. Nemstacionárius állapotok harmonikus potenciálban, koherens és préselt állapotok

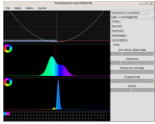
Miután megállapítottuk a kvantummechanikai harmonikus oszcillátor stacionárius állapotait, most már tetszőleges, az oszcillátor-potenciálban mozgó időfüggő állapot is fölírható. Ennek általános alakja:

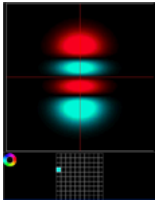
$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-i(n+1/2)\omega t} |n\rangle = e^{-i\omega t/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-in\omega t} |n\rangle \langle n|\Psi(0)\rangle, \quad (32.1)$$

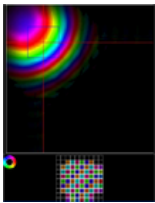
ahol $|\Psi(0)\rangle$ tetszőleges kezdőállapot, és így $c_n = \langle n|\Psi(0)\rangle$.

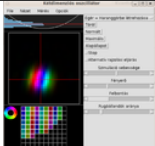
A következő oldalon oszcillátor potenciálban történő mozgásokat mutatunk be. Különböző speciális kezdőállapotokból kiindulva a hullámfüggvény időbeli változása követhető nyomon:

HARMONIKUS OSZCILLÁTOR: IDŐFÜGGŐ SZUPERPOZÍCIÓ		
		Az animáció az egydimenziós harmonikus oszcillátor $\frac{1}{\sqrt{2}}(0\rangle + 1\rangle)$ állapotának időbeli változását mutatja meg.
		Az animáció az egydimenziós harmonikus oszcillátor $\frac{1}{\sqrt{2}}(0\rangle + 2\rangle)$ állapotának időbeli változását mutatja meg.
		Az interaktív animáció segítségével az egydimenziós harmonikus oszcillátor energia-sajátállapotainak szuperpozícióit hozhatjuk létre, majd a normálás után az így létrehozott kvantumállapot időbeli változását vizsgálhatjuk, lásd a (32.1) formulát.

OSZCILLÁTOR JELLEGŰ POTENCIÁLOKBAN MOZGÓ RÉSZECSCKE		
		Ez a java applet egydimenziós, oszcillátor jellegű potenciálokban mozgó kvantumos részecske dinamikáját mutatja. A harmonikus oszcillátornál szokásos – a kitérés második hatványával arányos – potenciális energia mellett beállíthatunk a kitérés negyedik hatványával arányos potenciális energiát is. A további magyarázatokat és beállítási lehetőségeket illetően olvassuk el a „Részletes leírás”-t. RÉSZLETES LEÍRÁS

KÉTDIMENZIÓS HARMONIKUS OSZCILLÁTOR STACIONÁRIUS ÁLLAPOTA		
		A fázis időbeli változása kétdimenziós harmonikus oszcillátor potenciálban $n_1 = 0$, $n_2 = 3$ sajátállapotában (azaz a videón a vízszintes irány szerint alapállapotról, míg függőlegesen a harmadik gerjesztett állapotról van szó.) A színekódolás az alsó panel bal sarkában található, a komplex egységkörnek megfelelő ábráról olvasható le. A kis négyzetek a sajátállapotok betöltési valószínűségének és fázisának a szemléltetésére szolgálnak, esetünkben az egyetlen változó színű négyzet azt jelzi, hogy a rendszer egységnyi valószínűséggel a fenti sajátállapotban van.

HULLÁMCSOMAG MOZGÁSA KÉTDIMENZIÓS HARMONIKUS OSZCILLÁTOR-POTENCIÁLBAN		
		Hullámcsomag terjedése, szétfolyása majd újraegyesülése kétdimenziós harmonikus oszcillátor potenciálban. A színekódolás az alsó panel bal sarkában található, a komplex egységkörnek megfelelő ábráról olvasható le. A kis négyzetek a sajátállapotok betöltési valószínűségének és fázisának a szemléltetésére szolgálnak, a hullámcsomagot adó szuperpozícióban maga a szín az adott állapot időfüggő fázisát, míg a fekete felé csökkenő intenzitás az amplitúdót kódolja.

KÉTDIMENZIÓS HARMONIKUS OSZCILLÁTOR		
		Ez a java applet kétdimenziós harmonikus potenciálban mozgó kvantumos részecske dinamikáját mutatja. A további magyarázatokat és beállítási lehetőségeket illetően olvassuk el a „Részletes leírás”-t. RÉSZLETES LEÍRÁS

32.1. Koherens állapotok

Tekintsünk most speciálisan egy olyan – szokásosan $|\alpha\rangle$ -val jelölt – normált kezdőállapotot, amelyben a koordináta és az impulzus várható értéke x_0 illetve p_0 , ugyanakkor pedig mind a koordináta, mind az impulzus szórása ugyanannyi, mint a $|0\rangle$ jelzésű alapállapotban. Az előírás tehát

$$\langle\alpha|X|\alpha\rangle = x_0, \quad \langle\alpha|P|\alpha\rangle = p_0, \quad (32.2)$$

$$(\Delta X)_\alpha^2 = \langle\alpha|(X - x_0)^2|\alpha\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad (\Delta P)_\alpha^2 = \langle\alpha|(P - p_0)^2|\alpha\rangle = \frac{m\omega\hbar}{2}. \quad (32.3)$$

A keresett $|\alpha\rangle$ állapot tehát, csakúgy mint a $|0\rangle$ intelligens, mivel a szórások szorzata éppen a Heisenberg-egyenlőtlenség által megengedett minimális érték.

Egyszerűsödik a számolás, ha a dimenziótlan

$$\tilde{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger), \quad \tilde{P} = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}P = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) \quad (32.4)$$

koordináta- és impulzus operátorokat használjuk, amelyeket az előző szakasz alapján fejeztünk ki a -val és $a^\dagger$ -al. Ezekkel

$$\langle\alpha|\tilde{X}|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle\alpha|a + a^\dagger|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x_0 =: \xi_0, \quad (32.5)$$

$$\langle\alpha|\tilde{P}|\alpha\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}\langle\alpha|a^\dagger - a|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}p_0 =: \eta_0, \quad (32.6)$$

ahol ξ_0 és η_0 a megfelelő dimenziótlan (koordináta- és impulzus) várható értékek. Szorozzuk (32.6)-ot $i/\sqrt{2}$ -vel és adjuk hozzá (32.5) $1/\sqrt{2}$ szeresét. Ekkor

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\langle\alpha|\tilde{X} + i\tilde{P}|\alpha\rangle = \langle\alpha|a|\alpha\rangle = \frac{\xi_0 + i\eta_0}{\sqrt{2}}. \quad (32.7)$$

Vezessük be az

$$\alpha = \frac{\xi_0 + i\eta_0}{\sqrt{2}} \quad (32.8)$$

komplex számot, amely nem azonos az $|\alpha\rangle$ állapottal, de azzal szoros kapcsolatban áll, mert az a operátor várható értéke éppen α az $|\alpha\rangle$ állapotban:

$$\langle\alpha|a|\alpha\rangle = \alpha. \quad (32.9)$$

Ugyanúgy, az adjungált operátorra az $\langle\alpha|a^\dagger|\alpha\rangle = \alpha^*$ áll fenn. Az α komplex szám valós része a koordináta, képzetes része pedig az impulzus várható értékével arányos az $|\alpha\rangle$ állapoton véve.

A szórásnégyzetekre az előírás szerint ekkor a

$$(\Delta\tilde{X})_\alpha^2 = \langle\alpha|\tilde{X}^2|\alpha\rangle - \xi_0^2 = \frac{1}{2}, \quad (32.10)$$

$$(\Delta\tilde{P})_\alpha^2 = \langle\alpha|\tilde{P}^2|\alpha\rangle - \eta_0^2 = \frac{1}{2} \quad (32.11)$$

egyenlőségeknek kell teljesülniük. Adjuk össze ezt a két egyenlőséget, és fejezzük ki itt az $\tilde{X}^2$ és $\tilde{P}^2$ operátorokat a -val és $a^\dagger$ -al:

$$\begin{aligned} & (\Delta\tilde{X})^2 + (\Delta\tilde{P})^2 = \\ &= \frac{1}{2}\langle\alpha|(a + a^\dagger)^2 - (a^\dagger - a)^2|\alpha\rangle - \xi_0^2 - \eta_0^2 = 1. \end{aligned} \quad (32.12)$$

Végezzük el a négyzetre emeléseket, és vegyük figyelembe, az $aa^\dagger - a^\dagger a = 1$ kommutátort:

$$\langle \alpha | 2a^\dagger a + 1 | \alpha \rangle - 2\alpha\alpha^* = 1. \quad (32.13)$$

Mivel $|\alpha\rangle$ normált $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$, és $\langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle = \alpha\alpha^* = |\alpha|^2$, az

$$\langle \alpha | a^\dagger a - |\alpha|^2 | \alpha \rangle = 0 \quad (32.14)$$

föltételt kapjuk az $|\alpha\rangle$ állapotra.

Vezessünk be most a

$$b = a - \alpha, \quad b^\dagger = a^\dagger - \alpha^* \quad (32.15)$$

definícióval két új operátort. A $b^\dagger b$ operátor várható értéke az $|\alpha\rangle$ állapotban (32.9) és (32.14) figyelembe vételével:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | b^\dagger b | \alpha \rangle &= \langle \alpha | (a^\dagger - \alpha^*)(a - \alpha) | \alpha \rangle = \langle \alpha | (a^\dagger a - \alpha^* a - \alpha a^\dagger + |\alpha|^2) | \alpha \rangle = \\ &= \langle \alpha | (a^\dagger a - |\alpha|^2) | \alpha \rangle = 0. \end{aligned} \quad (32.16)$$

Az $\langle \alpha | b^\dagger b | \alpha \rangle = 0$ viszont éppen a $b | \alpha \rangle$ állapot norma-négyzete, amely akkor és csak akkor nulla, ha $b | \alpha \rangle = 0$, azaz $(a - \alpha) | \alpha \rangle = 0$. Ez másképpen az

$$a | \alpha \rangle = \alpha | \alpha \rangle \quad (32.17)$$

alakba írható, azaz a keresett $|\alpha\rangle$ állapotok éppen az a eltüntető operátor sajátállapotai. Noha a nem önadjungált, ezek a sajátállapotok – mint alább megmutatjuk – tetszőleges α -ra léteznek és normálhatók.

Keressük az $|\alpha\rangle$ állapotokat a teljes ortonormált rendszert alkotó $|n\rangle$ harmonikus oszcillátor sajátállapotok, vagy más néven *számállapotok* szuperpozíciójaként az

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle \quad (32.18)$$

alakban. Itt $c_n = \langle n | \alpha \rangle$. Írjuk vissza a kifejtést a (32.17) sajátérték-egyenletbe és használjuk az $a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$ léptető tulajdonságot:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \alpha c_n |n\rangle = a \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_{n+1} \sqrt{n+1} |n\rangle, \quad (32.19)$$

ahol az utolsó egyenlőségénél n helyett áttértünk az $n-1$ összegzőindexre. Emiatt

$$c_{n+1} = \frac{\alpha c_n}{\sqrt{n+1}}, \quad (32.20)$$

illetve

$$c_n = \frac{\alpha c_{n-1}}{\sqrt{n}} = \frac{\alpha^n c_0}{\sqrt{n!}}. \quad (32.21)$$

A normálási föltételből

$$1 = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = |c_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{\sqrt{n!}} = |c_0|^2 e^{|\alpha|^2}, \quad (32.22)$$

ahonnan $c_0 = e^{-|\alpha|^2/2}$, mivel c_0 -t konvenció szerint valósnak és pozitívnak választjuk. Eredményünk szerint tehát $c_n = \langle n | \alpha \rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \alpha^n / \sqrt{n!}$, s így a keresett állapot kifejtése a számállapotokon:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (32.23)$$

ahol α tetszőleges komplex szám. Ezeket az állapotokat a harmonikus oszcillátor *koherens* állapotainak nevezzük. A koherens állapotok tehát a komplex α számokkal indexelhetők, azaz az ilyen állapotok számossága nem megszámlálható. Ezeket az állapotokat koordinátareprezentáció segítségével először Schrödinger vezette be 1926-ban.

Felhívjuk a figyelmet még a következőkre. Az $|\alpha = 0\rangle$ koherens állapot azonos az $|n = 0\rangle$ számállapottal, amely éppen az oszcillátor alapállapota. Általában azonban az $|\alpha = k\rangle$ koherens állapot, ahol k éppen egész, nem azonos az $|n = k\rangle$ számállapottal. Ez a jelölés inkonzisztenciája, de ezt szinte egyöntetűen alkalmazzák az irodalomban, így mi is ehhez tartjuk itt magunkat.

32.1 Feladat: Igazoljuk fordított irányban, hogy ha a koherens állapotokat a (32.23) összefüggéssel definiáljuk, akkor ezek az a operátor sajátállapotai lesznek, α sajátértékkel.

32.2 Feladat: Igazoljuk, hogy a koordináta és az impulzus szórása tetszőleges $|\alpha\rangle$ állapotban megegyezik a $|0\rangle$ állapotban vett szórásokkal.

32.3 Feladat: Számítsuk ki az $|\alpha\rangle$ és $|\beta\rangle$ koherens állapot $\langle\alpha|\beta\rangle$ belső szorzatát.

A koherens állapotok időfejlődése a (32.1) általános képlet szerint:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= e^{-i\omega t/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-in\omega t} |n\rangle \langle n|\alpha\rangle = e^{-i\omega t/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-in\omega t} |n\rangle \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-|\alpha|^2/2} = \\ &= e^{-i\omega t/2} \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} e^{-|\alpha e^{-i\omega t}|^2/2} = |\alpha e^{-i\omega t}\rangle. \end{aligned} \quad (32.24)$$

Az az érdekes eredmény adódott tehát, hogy a kezdetben az α komplex számmal jelzett $|\alpha\rangle$ koherens állapot abba a szintén koherens állapotba kerül t idő múlva, amelyet az $\alpha e^{-i\omega t}$ komplex szám jelöl. Azaz az oszcillátor koherens állapota koherens marad az időfejlődés során. A valós és képzetes részeket illetően ezt a transzformációt az

$$\begin{aligned} \alpha e^{-i\omega t} &= \frac{\xi_0 + i\eta_0}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t} = \frac{1}{\sqrt{2}} [(\xi_0 \cos \omega t + \eta_0 \sin \omega t) + i(\eta_0 \cos \omega t - \xi_0 \sin \omega t)] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi(t) + i\eta(t)) \end{aligned} \quad (32.25)$$

képlet adja meg. Ebből a koordináta és az impulzus várható értékének időfejlődésére az $x(t) = \sqrt{\hbar/(m\omega)}\xi(t)$ és a $p(t) = \sqrt{m\omega\hbar}\eta(t)$ skálázás után az

$$x(t) = x_0 \cos \omega t + \frac{p_0}{m\omega} \sin \omega t, \quad (32.26)$$

$$p(t) = p_0 \cos \omega t - m\omega x_0 \sin \omega t \quad (32.27)$$

időfejlődés adódik, ami megegyezik a klasszikus harmonikus oszcillátor mozgásegyenletének megoldásával. Ez az utóbbi eredmény a koordináta és az impulzus várható értékére a harmonikus oszcillátorra valójában tetszőleges kezdőállapot esetén, tehát nem csak a $|\Psi(0)\rangle = |\alpha\rangle$ -ra teljesül, amint azt Ehrenfest tételeivel kapcsolatban a legfőbb kvadratikus potenciálokra általában is megmutattuk. Az X és P szórására ugyanilyen állandóság általános kezdőállapot esetén nem érvényes, de $|\Psi(0)\rangle = |\alpha\rangle$ esetén a fentiek szerint a szórások sem változnak időben, amint az közvetlen számítással is megmutatható.

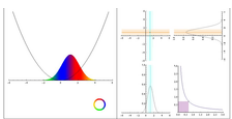
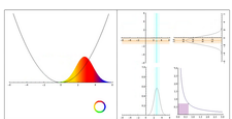
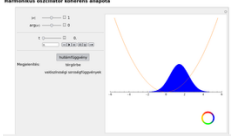
32.4 Feladat: Számítsuk ki közvetlenül az $\tilde{X}$ és $\tilde{P}$ szórását az $|\alpha e^{-i\omega t}\rangle$ állapotban.

A koherens állapot koordinátareprezentációban is megadható, ez legegyszerűbben az $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ sajátérték-egyenlet megfelelő alakjából kapható meg, hasonlóan ahhoz, ahogyan az alapállapotot megkaptuk az előző szakaszban a koordinátareprezentációban. Az alábbi animáción különböző koherens állapotok időfejlődését követhetjük nyomon.

32.5 Feladat: Mutassuk meg, hogy a koordinátareprezentáció alak az $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x_0 + i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}p_0$ komplex számmal jellemzett állapotban $\varphi_\alpha(x) = Ce^{-m\omega(x-x_0)^2/2\hbar}e^{ip_0x}$, ahol C ugyanaz a normálási állandó, ami az $x_0 = 0, p_0 = 0$ alapállapothoz is tartozik.

32.6 Feladat: Számítsuk ki az oszcillátor N operátorának várható értékét az $|\alpha\rangle$ állapotban.

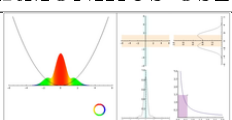
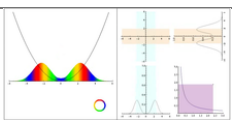
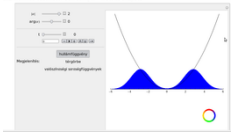
32.7 Feladat: Számítsuk ki N szórását az $|\alpha\rangle$ állapotban.

HARMONIKUS OSZCILLÁTOR: KOHERENS ÁLLAPOTOK		
		Az animáción a harmonikus oszcillátor $ \alpha = 1\rangle$ koherens állapotának időfejlődése látható. A hullámfüggvény abszolút értéke minden időpontban az alapállapottal azonos alakú, de ω körfrekvenciával rezeg az egyensúlyi helyzet körül $ \alpha $ -val arányos amplitúdóval.
		Az animáción a harmonikus oszcillátor $ \alpha = 2\rangle$ koherens állapotának időfejlődése látható. A hullámfüggvény abszolút értéke minden időpontban az alapállapottal azonos alakú, de ω körfrekvenciával rezeg az egyensúlyi helyzet körül $ \alpha $ -val arányos amplitúdóval.
		Az interaktív animáció segítségével az egydimenziós harmonikus oszcillátor energia-sajátállapotainak egy speciális szuperpozícióját vizsgálhatjuk, ez a koherens állapot, amit a (32.24) képlet szerint egy α komplex számmal jellemezhetünk. Ennek abszolút értéke minden időpontban az alapállapottal azonos alakú, de ω körfrekvenciával rezeg az egyensúlyi helyzet körül $ \alpha $ -val arányos amplitúdóval.

A harmonikus oszcillátor Schrödinger-macska állapotának szokás nevezni a két azonos abszolút értékű, de ellentétes előjelű α -hoz tartozó koherens állapotok szuperpozícióját:

$$|SC\rangle = (|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle)/\mathcal{N}. \quad (32.28)$$

Itt $\mathcal{N}$ a megfelelő normálási tényező. Ilyen állapotok időfejlődését mutatják az alábbi animációk:

HARMONIKUS OSZCILLÁTOR: SCHRÖDINGER-MACSKA ÁLLAPOTOK		
		Az animáción a harmonikus oszcillátor $\alpha = 1$ -hez tartozó Schrödinger-macska állapotának időfejlődését láthatjuk.
		Az animáción a harmonikus oszcillátor $\alpha = 2$ -höz tartozó Schrödinger-macska állapotának időfejlődését láthatjuk.
		Az interaktív animáció segítségével az egydimenziós harmonikus oszcillátor két koherens állapotának egy érdekes szuperpozícióját vizsgálhatjuk, ez a Schrödinger-macska állapot (Schrödinger-cat state), ami két koherens állapot normált szuperpozíciója: $ SC\rangle = (\alpha\rangle + -\alpha\rangle)/\mathcal{N}$, így ezt is az α komplex számmal jellemezhetjük.

32.2. Préselt koherens állapotok

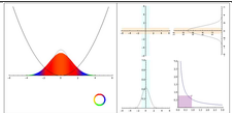
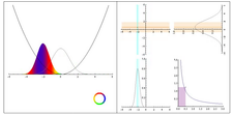
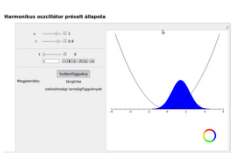
A harmonikus oszcillátor állapotai közül azok lehetséges érdekes alkalmazásai miatt különös figyelmet kaptak az 1980-as évek közepétől kezdve azok, amelyek a koherens állapotokhoz hasonlóan

minimalizálják a Heisenberg-egyenlőtlenséget, tehát intelligensek, ám ugyanakkor az X és P szórása közül az egyik kisebb, mint a $|0\rangle$ jelű alapállapotban. A Heisenberg-egyenlőtlenségnek viszont teljesülnie kell, tehát ilyenkor a másik mennyiség szórása viszont nagyobb, mint az alapállapot értéke. A kérdéses úgynevezett *préselt koherens*, vagy röviden préselt állapotokat itt $|\zeta\rangle$ -val fogjuk jelölni. Angolul ezeket *squeezed* állapotoknak nevezzük. A dimenziótlan $\tilde{X}$ és $\tilde{P}$ operátorok szórásnégyzeteire a $\langle\zeta|\tilde{X}|\zeta\rangle = \xi_0$, $\langle\zeta|\tilde{P}|\zeta\rangle = \eta_0$ jelölésekkel ekkor a

$$(\Delta\tilde{X})_\zeta^2 = \langle\zeta|\tilde{X}^2|\zeta\rangle - \xi_0^2 = \frac{r}{2}, \quad (32.29)$$

$$(\Delta\tilde{P})_\zeta^2 = \langle\zeta|\tilde{P}^2|\zeta\rangle - \eta_0^2 = \frac{1}{2r} \quad (32.30)$$

föltételek teljesülését kívánjuk meg, ahol r egy pozitív szám. Ha $r < 1$, akkor azt mondjuk, hogy a koordináta préselt és az impulzus nyújtott, míg ha $r > 1$, akkor az impulzus préselt és a koordináta nyújtott. Az $r = 1$ felel meg a fentebb látott koherens állapotnak. A préselt állapotok is kifejezhetők a számállapotok szerint, de ezt itt nem részletezzük, csak a $|\zeta\rangle$ állapotok időfejlődéséről mutatunk be alább animációt. A számítás szerint az időfejlődés során az r változik és az oszcillátor $2\pi/\omega$ periódusa alatt kétszer lesz 1-nél kisebb illetve nagyobb tehát az időfejlődés során az X és a P váltakozva lesz préselt illetve nyújtott.

HARMONIKUS OSZCILLÁTOR: PRÉSELT KOHERENS ÁLLAPOTOK		
		A harmonikus oszcillátor préselt alapállapota. Itt az állapot szórása is harmonikusan változik az alapállapot szórása körül 2ω frekvenciával.
		A harmonikus oszcillátor préselt koherens állapota. A koordináta várható értéke a szokásos ω körfrekvenciájú harmonikus rezgést végzi, miközben az állapot szórása az alapállapot értéke körül 2ω körfrekvenciával oszcillál.
		Az interaktív animáció segítségével az egydimenziós harmonikus oszcillátor energia-sajátállapotainak egy nevezetes szuperpozícióját vizsgálhatjuk, ez a préselt (v. összenyomott) állapot (az angol nyelvű szakirodalomban: squeezed state), amit egy r valós számmal és egy α komplex számmal jellemezhetünk.

33. Az impulzusnyomaték algebrai elmélete

Egy pontszerű részecske impulzusnyomatéka klasszikusan $\vec{\mathcal{L}} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Egy zárt részecskerendszer esetén a teljes rendszer impulzusnyomatéka megmarad. Ismeretes azonban a klasszikus mechanikából, hogy vannak esetek amikor, az impulzusnyomaték megmarad akkor is, ha a rendszer nem zárt. Ilyen például a centrális erőterben mozgó tömegpont esete.

A fenti klasszikus $\vec{\mathcal{L}}$ mennyiségnek megfelelő kvantumos impulzusnyomatékot úgy kapjuk, hogy az $\mathbf{r} \times \mathbf{p}$ vektori szorzatban a megfelelő operátorokkal helyettesítjük a klasszikus mennyiségeket, s nyerjük ezáltal a pályaimpulzusnyomaték operátorát:

$$\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}. \quad (33.1)$$

Ennek a vektornak három komponense van, amelyeket tömören az

$$L_i = \epsilon_{ijk} X_j P_k \quad (33.2)$$

formula ad meg, (ahol ϵ_{ijk} a Lévi-Civita szimbólum, és a kétszer előforduló indexekre összegezni kell). Azaz részletezve:

$$L_x = YP_z - ZP_y, \quad L_y = ZP_x - XP_z, \quad L_z = XP_y - YP_x. \quad (33.3)$$

Az $\mathbf{R}$ és $\mathbf{P}$ komponensei között fennálló kanonikus fölcserélési relációk alapján az impulzusnyomaték komponenseire a következő fölcserélési relációt nyerjük :

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k. \quad (33.4)$$

33.1 Feladat: Mutassuk meg a (33.4) összefüggés érvényességét.

Az impulzusnyomaték fogalmát most általánosítjuk, és a kvantummechanikai impulzusnyomatékot éppen a fölcserélési reláció alapján definiáljuk. Eszerint a kvantummechanikai impulzusmomentumnak legáltalánosabban egy olyan $\mathbf{J} = \{J_x, J_y, J_z\}$ lineáris és önadjungált operátorhármast nevezünk, amelynek komponensei a

$$[J_i, J_k] = i\hbar\epsilon_{ikl}J_l \quad (33.5)$$

fölcserélési relációknak tesznek eleget. Ennek, és a (33.4) eredménynek az alapján nyilvánvaló, hogy a főntebb $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$ -vel definiált mennyiség impulzusmomentum. De látható, hogy $\mathbf{J}$ bevezetésével itt elvonatkoztattunk az $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$ alaktól, és ez utóbbi tulajdonságai közül csak a fölcserélési relációt tartottuk meg. Ennek oka többek között az, hogy – mint kiderült – a kvantummechanikában van a térbeli mozgáshoz nem kapcsolódó belső impulzusmomentum, sajátperdület is, amelyet *spinnek* nevezünk (lásd a korábban tárgyalt Stern-Gerlach-kísérletet). Ez hasonlít a klasszikus fizikában valamely saját tengely körül forgó merev test sajátperdületéhez, például egy forgó labdához. Noha ez a hasonlat a kvantummechanika szerint távolról sem tökéletes, mégis valami ilyen jellegű forgásra lehet gondolni a spin hallatán. Fölhívjuk a figyelmet, hogy sem az impulzusmomentum, sem a spin nem keverendő egy másfajta mennyiséggel, a mágneses momentummal. Igaz viszont, hogy töltött részecskék impulzusmomentumához és spinjéhez általában azzal arányos mágneses momentum csatolódik, és ezért a spin, azaz a mechanikai perdület mérését a kapcsolódó mágneses momentum mérésére vezetik vissza. Az elektron sajátimpulzusmomentuma, azaz spinje nem értelmezhető az $\mathbf{L}$ segítségével, az általánosabb, csak a $\mathbf{J}$ komponenseire vonatkozó fölcserélési reláció előírásával viszont mindenfajta impulzusmomentum, pl. az elektron úgynevezett feles spinje is értelmezhető.

Egyszerűen bizonyítható, hogy a $\mathbf{J}^2 = J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ operátor bármely J_k komponenssel fölcserélhető:

$$[J^2, J_k] = 0, \quad k = x, y, z. \quad (33.6)$$

33.2 Feladat: Bizonyítsuk be a (33.6) összefüggést.

A fölcserélhető önadjungált operátorok közös sajátvektorainak létezéséről szóló tétel szerint, (20. szakasz) kereshető közös sajátvektorrendszere J^2 -nek és J_z -nek. A J^2 operátor várható értéke minden állapotban nemnegatív, ezért sajátértékei is nemnegatívak.

A dimenziókat figyelembe véve a sajátérték-egyenletek alakja:

$$J^2 |\varphi_{\lambda,m}\rangle = \hbar^2 \lambda^2 |\varphi_{\lambda,m}\rangle, \quad (33.7)$$

$$J_z |\varphi_{\lambda,m}\rangle = m\hbar |\varphi_{\lambda,m}\rangle, \quad (33.8)$$

ahol λ^2 nemnegatív valós szám, m valós szám. Egyszerűen adódik, hogy

$$m^2 \leq \lambda^2, \quad (33.9)$$

azaz

$$-\lambda \leq m \leq \lambda. \quad (33.10)$$

33.3 Feladat: Mutassuk meg a $\langle \varphi_{\lambda,m} | J^2 | \varphi_{\lambda,m} \rangle$ kifejezés kifejtésével a (33.9) relációt.

Vezessük be a

$$J_+ = J_x + iJ_y, \quad J_- = J_x - iJ_y \quad (33.11)$$

operátorokat. J^2 nyilvánvalóan ezekkel is fölcserélhető, s így

$$J^2 J_\pm |\varphi_{\lambda,m}\rangle = J_\pm J^2 |\varphi_{\lambda,m}\rangle = \hbar^2 \lambda^2 J_\pm |\varphi_{\lambda,m}\rangle. \quad (33.12)$$

Azaz J_+ és J_- nem vezetnek ki J^2 -nek egy adott λ^2 -el, azaz egy $\lambda \geq 0$ számmal indexelt sajátaltéréből. Nem ez a helyzet viszont J_z esetén mert, mint egyszerűen megmutatható:

$$[J_z, J_\pm] = \pm \hbar J_\pm, \quad (33.13)$$

így

$$J_z J_\pm |\varphi_{\lambda,m}\rangle = (J_\pm J_z \pm \hbar J_\pm) |\varphi_{\lambda,m}\rangle = \hbar(m \pm 1) J_\pm |\varphi_{\lambda,m}\rangle. \quad (33.14)$$

33.4 Feladat: Igazoljuk a (33.13) relációt.

A (33.14) egyenlőségből az következik, hogy vagy $J_\pm |\varphi_{\lambda,m}\rangle$ is sajátvektora J_z -nek $m \pm 1$ sajátértékkel, vagy a zéró vektor. Egyszerűen látható, hogy $J_\pm^k |\varphi_{\lambda,m}\rangle$, ahol k egész, szintén vagy sajátvektor $m \pm k$ sajátértékkel, vagy a zéró vektor. Adott λ esetén (amelyet mint láttuk $J_\pm$ nem változtat) azonban $-\lambda \leq m \leq \lambda$, amiből következik, hogy kell lennie egy olyan maximális és minimális m_+ illetve m_- valós számnak, amelyre a megfelelő $|\varphi_{\lambda,m_\pm}\rangle$ (a definíció szerint nem 0) sajátvektorok azaz:

$$J_z |\varphi_{\lambda,m_\pm}\rangle = m_\pm \hbar |\varphi_{\lambda,m_\pm}\rangle, \quad (33.15)$$

azonban

$$J_+ |\varphi_{\lambda,m_+}\rangle = 0, \quad J_- |\varphi_{\lambda,m_-}\rangle = 0. \quad (33.16)$$

Most megállapítjuk m_+ és m_- kapcsolatát, illetve m lehetséges értékeit. Tekintsük ehhez a

$$J_+ J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z, \quad (33.17)$$

$$J_- J_+ = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z \quad (33.18)$$

összefüggéseket, amelyek kiírással egyszerűen láthatók. Ezekből:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \varphi_{\lambda,m_+} | J_- J_+ | \varphi_{\lambda,m_+} \rangle = \langle \varphi_{\lambda,m_+} | J^2 - J_z^2 - \hbar J_z | \varphi_{\lambda,m_+} \rangle = \\ &= \hbar^2 (\lambda^2 - m_+^2 - m_+) \langle \varphi_{\lambda,m_+} | \varphi_{\lambda,m_+} \rangle, \end{aligned} \quad (33.19)$$

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \varphi_{\lambda,m_-} | J_+ J_- | \varphi_{\lambda,m_-} \rangle = \langle \varphi_{\lambda,m_-} | J^2 - J_z^2 + \hbar J_z | \varphi_{\lambda,m_-} \rangle = \\ &= \hbar^2 (\lambda^2 - m_-^2 + m_-) \langle \varphi_{\lambda,m_-} | \varphi_{\lambda,m_-} \rangle. \end{aligned} \quad (33.20)$$

Mivel $|\varphi_{\lambda,m_\pm}\rangle$ sajátvektorai J_z -nek, ezért nem a nulla vektorok, tehát az önmagukkal vett belső szorzatuk sem 0, így az előttük álló tényezőnek el kell tűnnie:

$$\lambda^2 - m_+^2 - m_+ = 0, \quad (33.21)$$

$$\lambda^2 - m_-^2 + m_- = 0. \quad (33.22)$$

A két egyenlet különbségének bal oldalát szorzattá alakíthatjuk:

$$(m_+ + m_-)(m_+ - m_- + 1) = 0, \quad (33.23)$$

amiből vagy az következik, hogy $m_+ = -m_-$ vagy az, hogy $m_- = m_+ + 1$. Az utóbbi viszont nem lehetséges, mert föltettük, hogy m_+ a legnagyobb sajátérték, tehát m_- nem lehet nála nagyobb. Marad tehát az

$$m_+ = -m_- =: j \quad (33.24)$$

lehetőség, ahol a fönti összefüggéssel definiáltuk a j számot, amely adott λ esetén tehát a legnagyobb sajátértéke J_z -nek. (33.21)-ből az is következik, hogy

$$\lambda^2 = m_+(m_+ + 1) = j(j + 1). \quad (33.25)$$

Az előzőek szerint egy m -el jellemzett $|\varphi_{\lambda,m}\rangle$ sajátvektorból indulva és J_+ -t, illetve J_- -t alkalmazva p -szer, illetve q -szor, léteznek olyan vektorok, amelyek a J_z -nek az

$$m, m + 1, \dots, m + p = m_+ = j, \quad (33.26)$$

$$m, m - 1, m - q = m_- = -j \quad (33.27)$$

$\hbar$ -al szorzott sajátértékeihez tartoznak, ahol p, q értelemszerűen egész számok. Az $m + p = m_+ = j$, és az $m - q = m_- = -j$ összefüggések különbségéből:

$$j = \frac{p + q}{2}. \quad (33.28)$$

Ebből a j kvantumszám lehetséges értékeire azt kapjuk, hogy

$$j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots \quad (33.29)$$

Az is látható ebből, hogy adott j kvantumszámhoz a következő $2j + 1$ darab m tartozik

$$j, j - 1, \dots, -j + 1, -j. \quad (33.30)$$

Eredményünk tehát, ha a sajátvektorok indexelésére a λ helyett a j -t használjuk és a

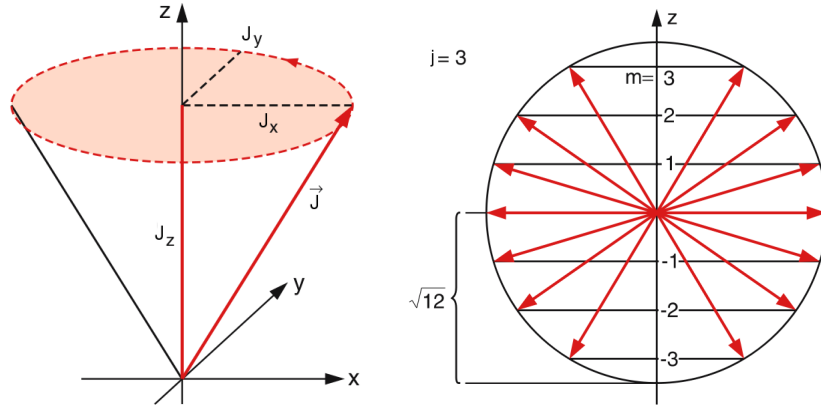
$$|\varphi_{j,m}\rangle =: |j, m\rangle \quad (33.31)$$

jelölést alkalmazzuk a következő:

$$J^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j + 1) |j, m\rangle, \quad (33.32)$$

$$J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle. \quad (33.33)$$

Megjegyezzük, hogy J^2 és J_z általában nem alkotnak CSCO-t, azaz van, vagy vannak további kvantumszámok, amelyek j és m mellett még szükségesek ahhoz, hogy egy kvantumállapotot valamely Hilbert-térben egyértelműen jellemezzünk. Másképpen szólva, adott j és m esetén a $|j, m\rangle$ állapotok között egy vagy több további fizikai mennyiség operátora különbséget tehet, vagyis ebből a szempontból az állapotok degeneráltak. Egy jól meghatározott állapot ilyenkor $|k, j, m\rangle$ alakú, ahol k utal a további J^2 -tel és J_z -vel fölcserélhető mennyiség(ek) sajátértékeire. Adott j esetén viszont az m szerinti degeneráció $2j + 1$ -szeres.



59. ábra. Az impulzusmomentum hossza és a vetületek viszonya a kvantummechanikában. Ha a J_z vetület, azaz az m kvantumszám adott, akkor a J_x és J_y vetületeknek nincs határozott értéke. Adott j esetén pedig a J_z vetület $2j + 1$ -szeresen degenerált.

Most megállapítjuk J_z , J_+ , J_- mátrixelemeit egy adott j és az $m = j \dots -j$ esetén a $2j + 1$ dimenziós tér $|j, m\rangle$ bázisában. Az előzőek szerint ebben a bázisban, amely J^2 sajátvektoraiból áll, a J^2 mátrixa diagonális, és minden sajátérték azonos $\hbar^2 j(j + 1)$. J_z mátrixa szintén diagonális és a $\hbar m$ különböző értékeit tartalmazza $m = j$ -től $m = -j$ -ig. Az előzőek szerint:

$$J_+ |j, m\rangle = c_+ |j, m + 1\rangle, \quad (33.34)$$

$$J_- |j, m\rangle = c_- |j, m - 1\rangle, \quad (33.35)$$

és keressük c_+ -t illetve c_- -t úgy, hogy $|j, m\rangle$ -el együtt $|j, m + 1\rangle$ és $|j, m - 1\rangle$ is normált legyen. Ekkor

$$\begin{aligned} \langle j, m | J_- J_+ |j, m\rangle &= \langle j, m | J^2 - J_z^2 - \hbar J_z |j, m\rangle = \hbar^2(j(j + 1) - m^2 - m) \langle j, m | j, m\rangle \\ &= |c_+|^2 \langle j, m + 1 | j, m + 1\rangle. \end{aligned} \quad (33.36)$$

Ha előírjuk a normálást, akkor $c_+ = \hbar \sqrt{j(j + 1) - m(m + 1)}$. Hasonlóan c_- -ra $J_+ J_-$ várható értékét számolva kapjuk, hogy $c_- = \hbar \sqrt{j(j + 1) - m(m - 1)}$, azaz

$$J_+ |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j + 1) - m(m + 1)} |j, m + 1\rangle, \quad (33.37)$$

$$J_- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j + 1) - m(m - 1)} |j, m - 1\rangle. \quad (33.38)$$

Ezekből J_x illetve J_y mátrixa is meghatározható, a (33.11)-ből következő $J_x = (J_+ + J_-)/2$ és $J_y = (J_+ - J_-)/2i$ formulákból. A $j = 1/2$ esetben, amelyet *feles spinű* esetnek nevezünk, ezekből a képletekből az $m = 1/2$, $m = -1/2$ sorrendben írva a mátrixelemeket a

$$J_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_x, \quad J_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_y, \quad (33.39)$$

$$J_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z \quad (33.40)$$

mátrixokat kapjuk, ahol a $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ mátrixok az úgynevezett Pauli-mátrixok. Megjegyezzük még, hogy a $j = 1/2$ esetben a megfelelő impulzusmomentum operátorokat $\mathbf{S} = \{S_x, S_y, S_z\}$ -vel is szoktuk jelölni a spinre való utalással.

Wolfgang Pauli (1900-1958)

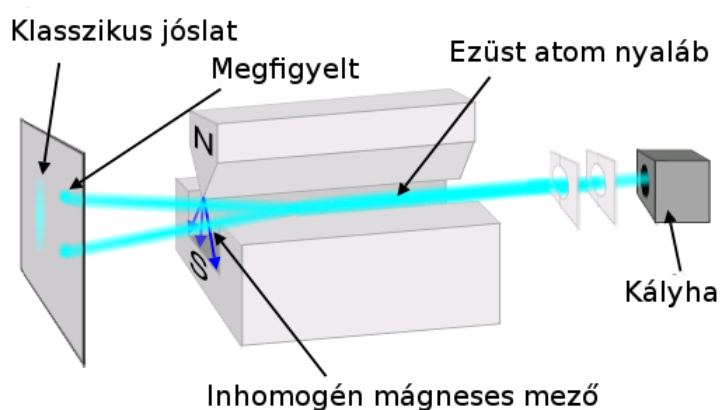


60. ábra.

33.5 Feladat: Mutassuk meg, hogy $j = 1/2$ esetén valóban a fenti (33.39,33.40) Pauli-mátrixok adódnak J_x, J_y, J_z -re.

33.6 Feladat: Írjuk föl $j = 1$ esetén a J_+, J_-, J_z, J_x, J_y mátrixokat.

34. Stern-Gerlach-kísérlet, feles spin sajátállapotai tetszőleges irányban



61. ábra. Stern-Gerlach-kísérlet sematikus ábrája

Azt a kérdést vizsgáljuk, hogy egy $\mathbf{n}_1$ irányú Stern-Gerlach berendezésből kijövő részecskék egy $\mathbf{n}$ irányú inhomogén mágneses térrel ($\mathbf{B}$) jellemzett berendezés egyes kimenő csatornáiba milyen valószínűségi amplitúdókkal érkeznek. Itt csak a feles spinnel, azaz pl. az ezüstatomok esetével foglalkozunk. Legyen $\mathbf{n}_1$ iránya a z irány. Az ezüstatomoknak mágneses nyomatékuk van, potenciális energiájuk az elektrodinamikából ismeretesen $W = -\mathbf{m}\mathbf{B}$. Az $\mathbf{m}$ mágneses nyomaték arányos a $\mathbf{J}$ mechanikai nyomatékkal, amelyet ebben a $j = 1/2$ esetben $\mathbf{S}$ -el jelölünk, utalva a spinre. A

mágneses dipólusra erő hat, amelyet a $\mathbf{F} = -\nabla W$ képlet alapján számolhatunk ki. E szerint

$$\mathbf{F} = \nabla(\mathbf{mB}) = \gamma \nabla(\mathbf{SB}). \quad (34.1)$$

Itt $\mathbf{m}$ állandó, és ha $\mathbf{B}$ is az, akkor $\mathbf{F} = 0$. Homogén térben tehát nem hat erő a mágneses nyomatékkal bíró részecskére. Ha viszont a $\mathbf{B}$ inhomogén, és az inhomogenitás fő iránya az $\mathbf{n}$ irány, azaz ebben az irányban változik leggyorsabban a mágneses mező, akkor $\mathbf{F} = \nabla(\mathbf{mB}) = \gamma \mathbf{Sn} \frac{\partial}{\partial n} B_n$.

Meg fogjuk keresni az $\mathbf{n}$ egységvektor irányába eső spinvetület, azaz az $\mathbf{Sn} = S_n$ sajátértékeit és sajátvektorait, tehát az

$$\mathbf{Sn} |\varphi_n\rangle = \frac{\hbar}{2} \mu |\varphi_n\rangle \quad (34.2)$$

egyenlet megoldását, ahol a sajátértékből kiemeljük a $\hbar/2$ -t, így μ dimenziótlán. A $|\varphi_n\rangle$ -t abban a $|j = 1/2, m = 1/2\rangle = |z, +\rangle$, $|j = 1/2, m = -1/2\rangle = |z, -\rangle$ bázisban keressük, amelyben S_z diagonális. Tehát a

$$|\varphi_n\rangle = \alpha_n |z, +\rangle + \beta_n |z, -\rangle \quad (34.3)$$

kifejtésben az α_n és β_n együtthatókat határozzuk meg. A sajátérték-egyenlet:

$$\mathbf{Sn} |\varphi_n\rangle = S_n(\alpha_n |z, +\rangle + \beta_n |z, -\rangle) = \frac{\hbar}{2} \mu (\alpha_n |z, +\rangle + \beta_n |z, -\rangle) \quad (34.4)$$

szorozzuk előbb $|z, +\rangle$ -al, majd $|z, -\rangle$ -al és használjuk az ortogonalitást. Ekkor éppen az $\mathbf{Sn}$ operátor $|z, +\rangle$, $|z, -\rangle$ bázisban vett mátrixának sajátértékegyenletét kapjuk. Ez a mátrix a (33)-ban megadott mátrixok alapján az $\mathbf{n} = \{n_x, n_y, n_z\}$ komponensekkel, illetve gömbi koordinátákat használva az $\mathbf{n} = \{\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta\}$ miatt

$$\mathbf{Sn} = S_x n_x + S_y n_y + S_z n_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} n_z & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & -n_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (34.5)$$

alakú. A sajátérték-egyenlet tehát a választott bázisban:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \mu \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (34.6)$$

ahol az n indexet mostantól nem írjuk ki az együtthatók mellé. A sajátértékekre $\mu = \pm 1$, a megfelelő normált ($|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$) sajátvektorokra pedig

$$\mu = 1 : \quad e^{i\delta_+} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad \mu = -1 : \quad e^{i\delta_-} \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (34.7)$$

adódik, ahol δ_+ és δ_- tetszőleges fázisok. Gyakori választás a $\delta_+ = \delta_- = -\phi/2$, vagy a $\delta_+ = \delta_- = 0$. Azaz a két – ortogonális – sajátvektor a $|z, \pm\rangle$ bázisban az utóbbi választással

$$|n, +\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |z, +\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} |z, -\rangle, \quad (34.8)$$

$$|n, -\rangle = -\sin \frac{\theta}{2} |z, +\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi} |z, -\rangle, \quad (34.9)$$

Ezekből ki lehet fejezni az S_z operátor $|z, +\rangle$ és $|z, -\rangle$ sajátvektorait:

$$|z, +\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |n, +\rangle - \sin \frac{\theta}{2} |n, -\rangle, \quad (34.10)$$

$$|z, -\rangle = \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} |n, +\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} |n, -\rangle. \quad (34.11)$$

A fenti egyenletekből megállapítható, hogy egymáshoz képest elforgatott Stern-Gerlach berendezéseken át milyen $\langle n, +|z, +\rangle$ stb. amplitúdókkal, illetve valószínűségekkel mennek át a feles spinű részecskék.

34.1 Feladat: Határozzuk meg a z irányú berendezés után elhelyezett x illetve y irányú berendezésén való áthaladási amplitúdókat és valószínűségeket.

34.2 Feladat: Mik az amplitúdók ha az első berendezés n_1 a második n_2 irányú?

34.3 Feladat: Keressük meg az amplitúdókat a $j = 1$ spin esetére.

35. Pályaimpulzusnyomaték, gömbi harmonikusok

Az alkalmazások szempontjából nagyon fontosak a pályaimpulzusmomentum koordinátareprezentációban kiszámított sajátvektorai. Mint azt a 33. szakaszban láttuk, az

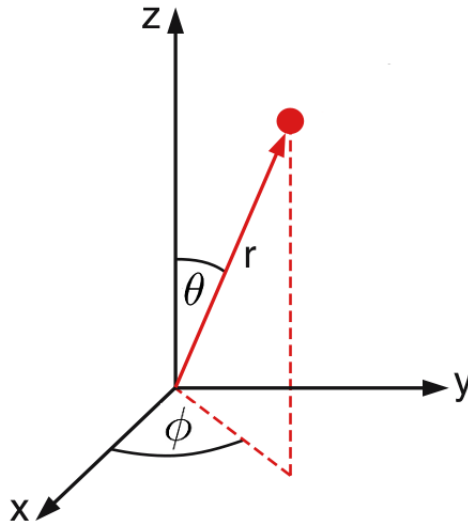
$$\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P} \quad (35.1)$$

vektor komponensei teljesítik az $[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$ kommutációs relációkat, hiszen ennek alapján általánosítottuk az impulzusmomentum definícióját a $\mathbf{J}$ vektor komponenseire. Emiatt az ott kapott eredményeket itt is használhatjuk.

Tekintsük most koordinátareprezentációban az

$$\hat{L}_x = -i\hbar(y\partial_z - z\partial_y) \quad (35.2)$$

stb. pályaimpulzusmomentum operátorokat.



62. ábra. Gömbi polárkoordináták

Ki fog derülni, hogy ezek alakja egyszerűbb az r, θ, ϕ gömbi koordináták használatakor, mert a három derékszögű koordináta x, y és z helyett csak két gömbi koordináta, a θ polárszög és a ϕ azimutszög szerepel a kifejezésükben, a radiális koordináta r nem. Ennek mélyebb oka, hogy az impulzusnyomaték komponensei a forgatásokkal vannak kapcsolatban, ezért a r -et nem változtatják. A gömbi koordinátákba történő transzformációt elvégezhetjük a deriváltak transzformációjával, de gyorsabban érünk célra a következő módon. Írjuk föl egy pont helyvektorát a gömbi koordinátákkal és derékszögű egységvektorokkal.

$$\mathbf{r} = x \hat{\mathbf{e}}_x + y \hat{\mathbf{e}}_y + z \hat{\mathbf{e}}_z = r \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{e}}_x + r \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{e}}_y + r \cos \theta \hat{\mathbf{e}}_z. \quad (35.3)$$

A megfelelő görbevonalú egységvektorok $\hat{\mathbf{e}}_i = \frac{1}{h_i} \partial_{q_i} \mathbf{r}$ ($i = r, \theta, \phi$), ahol a $h_i = |\partial_{q_i} \mathbf{r}|$ együtthatók a normálást biztosítják. A fenti kifejezésből a deriváltak és a normálás ($h_r = 1, h_\theta = r, h_\phi = r \sin \theta$) után kapjuk a görbevonalú egységvektorokat:

$$\hat{\mathbf{e}}_r = \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{e}}_x + \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{e}}_y + \cos \theta \hat{\mathbf{e}}_z = \mathbf{r}/r, \quad (35.4)$$

$$\hat{\mathbf{e}}_\theta = \cos \theta \cos \phi \hat{\mathbf{e}}_x + \cos \theta \sin \phi \hat{\mathbf{e}}_y - \sin \theta \hat{\mathbf{e}}_z, \quad (35.5)$$

$$\hat{\mathbf{e}}_\phi = -\sin \phi \hat{\mathbf{e}}_x + \cos \phi \hat{\mathbf{e}}_y. \quad (35.6)$$

Jól ismert, de közvetlenül is meggyőződhetünk róla, hogy ezek páronként ortogonálisak egymásra, és $\hat{\mathbf{e}}_r \times \hat{\mathbf{e}}_\theta = \hat{\mathbf{e}}_\phi$, $\hat{\mathbf{e}}_r \times \hat{\mathbf{e}}_\phi = -\hat{\mathbf{e}}_\theta$, stb. A pályaimpulzusmomentum alakja koordinátareprezentációban:

$$\mathbf{L} = -i\hbar(\mathbf{r} \times \nabla). \quad (35.7)$$

Itt $\mathbf{r} = r\hat{\mathbf{e}}_r$, a ∇ gradiens ortogonális görbevonalú koordinátás alakja pedig:

$$\nabla = \sum_i \hat{\mathbf{e}}_i \frac{1}{h_i} \frac{\partial}{\partial q_i} = \hat{\mathbf{e}}_r \partial_r + \hat{\mathbf{e}}_\theta \frac{1}{r} \partial_\theta + \hat{\mathbf{e}}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi. \quad (35.8)$$

Így az impulzusmomentum alakja a vektori szorzatokkal:

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= -i\hbar r (\hat{\mathbf{e}}_\phi \frac{1}{r} \partial_\theta - \hat{\mathbf{e}}_\theta \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi) = \\ &= -i\hbar \left\{ (-\sin \phi \hat{\mathbf{e}}_x + \cos \phi \hat{\mathbf{e}}_y) \partial_\theta - (\cos \theta \cos \phi \hat{\mathbf{e}}_x + \cos \theta \sin \phi \hat{\mathbf{e}}_y - \sin \theta \hat{\mathbf{e}}_z) \frac{1}{\sin \theta} \partial_\phi \right\}. \end{aligned} \quad (35.9)$$

Összegyűjtve az $\hat{\mathbf{e}}_x, \hat{\mathbf{e}}_y, \hat{\mathbf{e}}_z$ együtthatóit kapjuk, hogy

$$\hat{L}_x = i\hbar(\sin \phi \partial_\theta + \cot \theta \cos \phi \partial_\phi), \quad (35.10)$$

$$\hat{L}_y = i\hbar(-\cos \phi \partial_\theta + \cot \theta \sin \phi \partial_\phi), \quad (35.11)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \partial_\phi. \quad (35.12)$$

A léptető operátorok koordinátareprezentációs alakja:

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y = \hbar e^{i\phi} (\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi), \quad (35.13)$$

$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y = \hbar e^{-i\phi} (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi). \quad (35.14)$$

Szükségünk van még az L^2 operátorra is, amelyet legegyszerűbben a 33. szakaszban látott (33.17)

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z \quad (35.15)$$

összefüggés alapján számíthatunk ki.

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ \hat{L}_- &= \hbar^2 e^{i\phi} (\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) \left[e^{-i\phi} (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) \right] = \\ &= \hbar^2 \partial_\theta (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) + \hbar^2 e^{i\phi} i \cot \theta \partial_\phi \left[e^{-i\phi} (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) \right] = \\ &= \hbar^2 (-\partial_\theta^2 - i \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi + i \cot \theta \partial_\theta \partial_\phi + \cot \theta (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) - \\ &\quad - i \cot \theta \partial_\theta \partial_\phi - \cot^2 \theta \partial_\phi^2) = \\ &= \hbar^2 (-\partial_\theta^2 - i \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi + \cot \theta (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) - \cot^2 \theta \partial_\phi^2) = \\ &= \hbar^2 (-\partial_\theta^2 - i \partial_\phi - \cot \theta \partial_\theta - \cot^2 \theta \partial_\phi^2). \end{aligned} \quad (35.16)$$

Az $\hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \partial_{\phi}^2$, továbbá $-\hbar \hat{L}_z = i\hbar^2 \partial_{\phi}$ fölhasználásával adódik L^2 gömbi koordinátás alakja:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\partial_{\theta}^2 + \cot \theta \partial_{\theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_{\phi}^2 \right) = -\hbar^2 \Delta_{\theta\phi}. \quad (35.17)$$

Ismeretes, hogy itt a $-\hbar^2$ -et szorzó differenciáloperátor éppen a Δ Laplace-operátor gömbi koordinátákban fölírt alakjának szögektől függő része, erre utal a második egyenlőségjel után az $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta\phi}$ jelölés.

A (35.17) és a (35.12) alapján könnyen látható, hogy az L^2 -nek és az L_z -nek megfelelő differenciáloperátorok fölcserélhetők, s ezt el is várjuk, hiszen ez az általános (33.6) fölcserélhetőségi eredmény speciális esete. Némileg hosszabb számolással ugyan, de belátható, hogy hasonlóan (35.17) és 35.13 illetve (35.14) is fölcserélhetők.

Az általános elméletből (33. szakasz) tudjuk, hogy fölcserélhetők lévén kereshetjük $\hat{L}^2$ és $\hat{L}_z$ közös sajátfüggvényrendszerét, a korábban látott (33.32) és (33.33) sajátérték-egyenleteknek megfelelő sajátértékekkel. Az L^2 -nek megfelelő kvantumszámot itt j helyett ℓ -el szokás jelölni, ℓ neve ekkor mellékkvantumszám. Így:

$$\hat{L}^2 \psi(r, \theta, \phi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) \psi(r, \theta, \phi), \quad (35.18)$$

$$\hat{L}_z \psi(r, \theta, \phi) = m \hbar \psi(r, \theta, \phi). \quad (35.19)$$

Látni fogjuk, hogy a 33. szakaszban kapott eredmény a megengedett sajátértékekre itt csak megszorítással lesz érvényes. A pályaimpulzusmomentum esetén az ℓ mellékkvantumszám csak egész értékű lehet, félegész nem, és ugyanez áll az L_z sajátértékeit megadó mágneses kvantumszámra is, azaz itt m is csak egész lehet.

Keressük tehát a $\psi(r, \theta, \phi)$ sajátfüggvényeket. Mivel láthatólag sem $\hat{L}^2$, sem $\hat{L}_z$ nem függ r -től, a megoldás

$$\psi(r, \theta, \phi) = \mathcal{R}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \phi) \quad (35.20)$$

alakú, ahol $\mathcal{R}(r)$ a radiális koordináta tetszőleges függvénye, $Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$ pedig a

$$-(\partial_{\theta}^2 + \cot \theta \partial_{\theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_{\phi}^2) Y_{\ell}^m(\theta, \phi) = \ell(\ell+1) Y_{\ell}^m(\theta, \phi), \quad (35.21)$$

$$-i \partial_{\phi} Y_{\ell}^m(\theta, \phi) = m Y_{\ell}^m(\theta, \phi) \quad (35.22)$$

egyenletek megoldása. Foglalkozzunk előbb a másodikkal, amelyben nincs θ szerinti deriválás. Ezért abból láthatólag

$$Y_{\ell}^m(\theta, \phi) = F_{\ell}^m(\theta) e^{im\phi}. \quad (35.23)$$

Mivel a térben a ϕ és a $\phi + 2\pi$ helyek azonosak, a függvénynek ezeken a helyeken ugyanazt az értéket kell fölvennie, amiből $e^{i2\pi m} = 1$. Ebből következik, hogy most az m csak egész szám lehet, szemben az általános elméletben kapott eredménnyel, amely félegész értékeket is megengedett. Viszont tudjuk, hogy ha m egész akkor ℓ is egész kell, hogy legyen.

Válasszunk egy ℓ egész számot. Tudjuk az általános elméletből (lásd. 33. szakasz), hogy $m = m_+ = \ell$ esetén

$$\hat{L}_+ Y_{\ell}^{\ell}(\theta, \phi) = 0. \quad (35.24)$$

Ide beírva (35.13)-at és (35.23)-at $m = \ell$ -lel, és leosztva $\hbar e^{i(\ell+1)\phi}$ -vel kapjuk, hogy

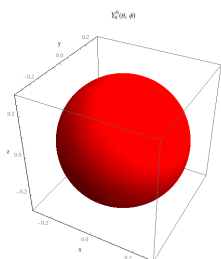
$$(\partial_{\theta} - \ell \cot \theta) F_{\ell}^{\ell}(\theta) = 0. \quad (35.25)$$

Ennek az elsőrendű közönséges differenciálegyenletnek az általános megoldása

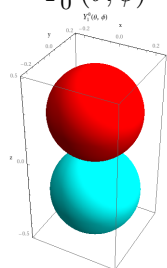
$$F_{\ell}^{\ell}(\theta) = c_{\ell} (\sin \theta)^{\ell}, \quad (35.26)$$

ahol c_{ℓ} alkalmasan választandó normálási tényező. Ebből a konstans erejéig egyértelmű

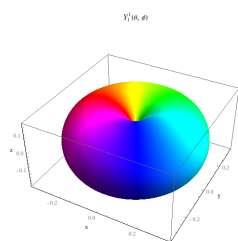
$$Y_{\ell}^{\ell}(\theta, \phi) = c_{\ell} (\sin \theta)^{\ell} e^{i\ell\phi} \quad (35.27)$$



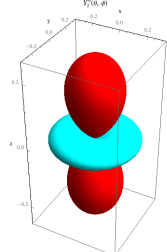
$$Y_0^0(\theta, \phi)$$



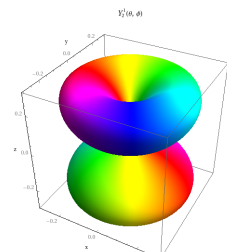
$$Y_1^0(\theta, \phi)$$



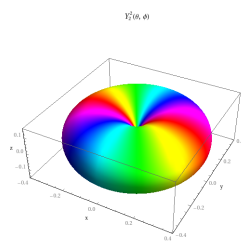
$$Y_1^1(\theta, \phi)$$



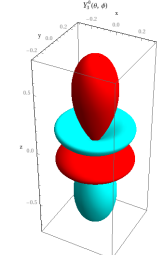
$$Y_2^0(\theta, \phi)$$



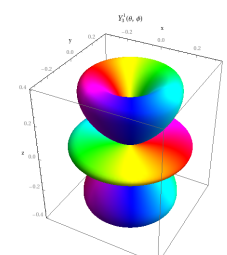
$$Y_2^1(\theta, \phi)$$



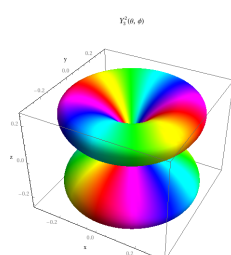
$$Y_2^2(\theta, \phi)$$



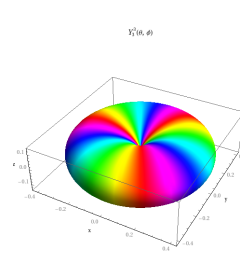
$$Y_3^0(\theta, \phi)$$



$$Y_3^1(\theta, \phi)$$



$$Y_3^2(\theta, \phi)$$



$$Y_3^3(\theta, \phi)$$

63. ábra. Az első néhány gömbfüggvény

megoldást kapjuk. Innen pedig a további, $m < \ell$: $Y_{\ell}^{\ell-1}(\theta, \phi), \dots, Y_{\ell}^m(\theta, \phi), \dots, Y_{\ell}^{-\ell}(\theta, \phi)$ megoldások az általános elmélet alapján az $\hat{L}_-$ operátor ismételt alkalmazásával kaphatók meg. Az $Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$ függvényeket *gömbfüggvényeknek*, vagy *gömbi harmonikusoknak* szokás nevezni. Megjegyezzük, hogy ezeket a (35.21, 35.22) egyenleteknek az egységgömb felületén négyzetesen integrálható megoldásaként is meg lehet kapni. A gömbfüggvények egy konstans erejéig egyértelműen meghatározottak. Az állandó abszolút értékét a normálás határozza meg. (A gömbfüggvények használatakor figyeljünk arra, hogy a néha képzetesnek is választott normálási tényezőt illetően annak, mint komplex számnak az argumentumára többféle konvenció is használatos.) A függvények a normálás után egy ortonormált rendszert alkotnak, azaz az egységgömb felületére integrálva:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} (Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \phi))^* Y_{\ell}^m(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}. \quad (35.28)$$

A gömbfüggvények rendszere teljes is, azaz tetszőleges, az egységgömbön értelmezett négyzetesen integrálható $g(\theta, \phi)$ függvény kifejezhető ezek általában végtelen összegeként:

$$g(\theta, \phi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} c_{\ell m} Y_{\ell}^m(\theta, \phi). \quad (35.29)$$

A fenti (35.28) és (35.29) formulák a komplex Fourier-sor általánosításai. A periodikus, azaz az egységkörön értelmezett függvények helyett itt azonban az egységgömbön értelmezett függvényekről van szó.

Egy további tulajdonságot még jegyezzünk meg: Az $m = 0$ indexű $Y_{\ell}^0(\theta)$ függvények, amelyek nem függenek ϕ -től lényegében a $\cos \theta$ -tól függő Legendre-polinomok

$$Y_{\ell}^0(\theta) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_{\ell}(\cos \theta), \quad (35.30)$$

ahol a $P_{\ell}(z)$ a $[-1, 1]$ intervallumon teljes ortogonális polinomrendszer $P_{\ell}(1) = 1$ választással. Az $\ell = 0, 1, 2, 3, 4$ indexű gömbfüggvényeket rendre s, p, d, f, g függvényeknek szokás nevezni a spektrószkópiából kölcsönzött elnevezések miatt.

Az első néhány gömbfüggvény az egyik szokásos fáziskonvenció szerint, ahol a normálási tényezők valóságosak, a következő:

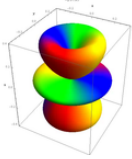
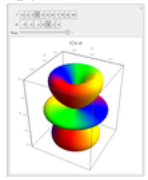
$$Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad (35.31)$$

$$Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_1^1(\theta, \phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi} \quad Y_1^{-1}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi}. \quad (35.32)$$

Az $Y_0^0(\theta, \phi)$ a konstans, tehát gömbszimmetrikus s függvény, a (35.32) sorban megadott függvények pedig a p függvények.

A gömbfüggvények további tulajdonságai, a fáziskonvenciók és más általános formulák kvantummechanika illetve matematikai fizika könyvekben találhatók meg. Lásd továbbá

http://en.wikipedia.org/wiki/Spherical_harmonics

GÖMBFÜGGVÉNYEK		
		Az animáción az $Y_3^1(\theta, \phi)$ gömbfüggvénnyel jellemzett stacionárius – azaz $e^{-iet/\hbar}$ időüggést is tartalmazó – állapot időfüggését láthatjuk. Az ábra úgy készült, hogy a függvény abszolút értékét felmérjük a szögek által meghatározott irányba, az így kialakított felületet pedig a komplex függvényérték fázisszögének színskódjával színezzük.
		Az ábrák a gömbfüggvények háromdimenziós polárdiagramját mutatják. Az ábrázolni kívánt állapotot az ℓ és m kvantumszámok beállításával választhatjuk ki.

36. A térbeli paritás

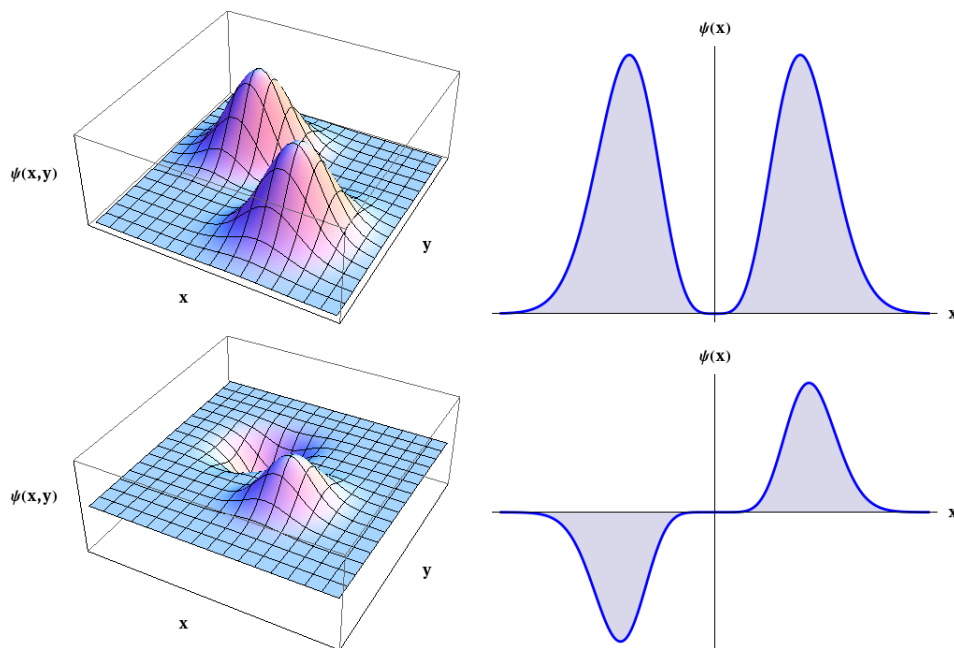
36.1. A paritás definíciója

A paritás vagy párosság operátora olyan $\mathcal{H}$ térben van értelmezve, amelynek elemei egy részecske állapotát adják meg a háromdimenziós koordinátatérben. Defináljuk a paritás-operátort a $\psi(\mathbf{r})$ hullámfüggvények terén a következőképpen:

$$\Pi\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}). \quad (36.1)$$

Belátható, hogy Π önadjungált és unitér is egyben, tehát az inverze saját maga, ami amúgy is egyszerűen látszik a fenti definícióból.

36.1 Feladat: Bizonyítsuk, hogy Π önadjungált és unitér operátor.



64. ábra. Példa páros és páratlan függvényre

Π sajátértékei nyilvánvalóan a ± 1 számok. A Π megfelelő sajátfüggvényei az origóra való tükrözésre nézve a páros illetve a páratlan függvények. A Π nyilván hasonlóan értelmezhető az x

tengelyen értelmezett egydimenziós hullámfüggvények terén is. Tekintsük az $\Pi \mathbf{R}$ operátort a $\psi(\mathbf{r})$ hullámfüggvények terén. Egyrészt $\Pi \mathbf{R} \psi(\mathbf{r}) = \Pi \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) = -\mathbf{r} \psi(-\mathbf{r}) = -\mathbf{r} \Pi \psi(\mathbf{r}) = -\mathbf{R} \Pi \psi(\mathbf{r})$, azaz $\Pi \mathbf{R} = -\mathbf{R} \Pi$. Tehát

$$\Pi \mathbf{R} = -\mathbf{R} \Pi, \quad \text{vagy} \quad \mathbf{R} \Pi + \Pi \mathbf{R} = 0. \quad (36.2)$$

Illetve

$$\Pi \mathbf{R} \Pi = -\mathbf{R}. \quad (36.3)$$

Az ilyen tulajdonságú operátort páratlannak nevezünk. $\mathbf{R}$ mellett a $\mathbf{P}$ impulzusoperátor is páratlan, ami tulajdonképpen azt jelenti, hogy koordináta-rendszer-középpontjára való tükrözésekor az impulzus – csakúgy mint a koordináta – előjelet vált.

36.2 Feladat: Bizonyítsuk, hogy az impulzus $\mathbf{P}$ operátora páratlan.

Azokat az itt általában $\mathbf{K}$ -val jelölt operátorokat viszont, amelyek fölcserélhetők Π -vel, azaz (36.2)-vel szemben a

$$\Pi \mathbf{K} = \mathbf{K} \Pi, \quad \text{vagy} \quad \mathbf{K} \Pi - \Pi \mathbf{K} = 0 \quad (36.4)$$

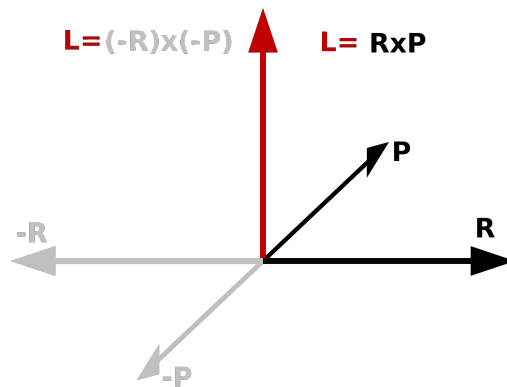
összefüggésnek tesznek eleget, a tértükrözésre nézve páros operátornak nevezzük. Páros operátor nyilvánvalóan egy páratlan operátor négyzete. Tehát páros például a kinetikus energia operátora, mert $\mathbf{P}^2$ -el arányos, de páros egy centrális erőter esetén a teljes Hamilton-operátor mert az $|\mathbf{R}|$ operátor, amitől centrális erőterben a potenciális energia függ szintén páros. Ekkor, mint tudjuk a H -nak és Π -nek van közös sajátvektorrendszere, azaz H sajátvektorai között vannak párosak és páratlanok. Megjegyezzük, hogy H -nak ettől függetlenül lehetnek olyan sajátvektorai is, amelyek sem nem párosak sem nem páratlanok!

36.2. Kapcsolat a pályaimpulzusmomentummal

Először is tekintsük a pályaimpulzusmomentum

$$\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P} \quad (36.5)$$

operátorát. Ez a föntiek szerint páros $\Pi \mathbf{L} = \mathbf{L} \Pi$, mert tükrözéskor mind $\mathbf{R}$, mind $\mathbf{P}$ előjelet vált. Ezért is nevezzük $\mathbf{L}$ -et *pszeudovektornak*, vagy *axiális* vektornak, mert a "közönséges", másnéven *poláris* vektorok előjelet váltanak tükrözéskor. $\mathbf{L}$ viszont tükrözéskor nem vált előjelet, $\mathbf{L}$ csak a forgatásokkal szemben viselkedik vektorként (lásd 65. ábra). $\mathbf{L}$ mindhárom komponense páros.

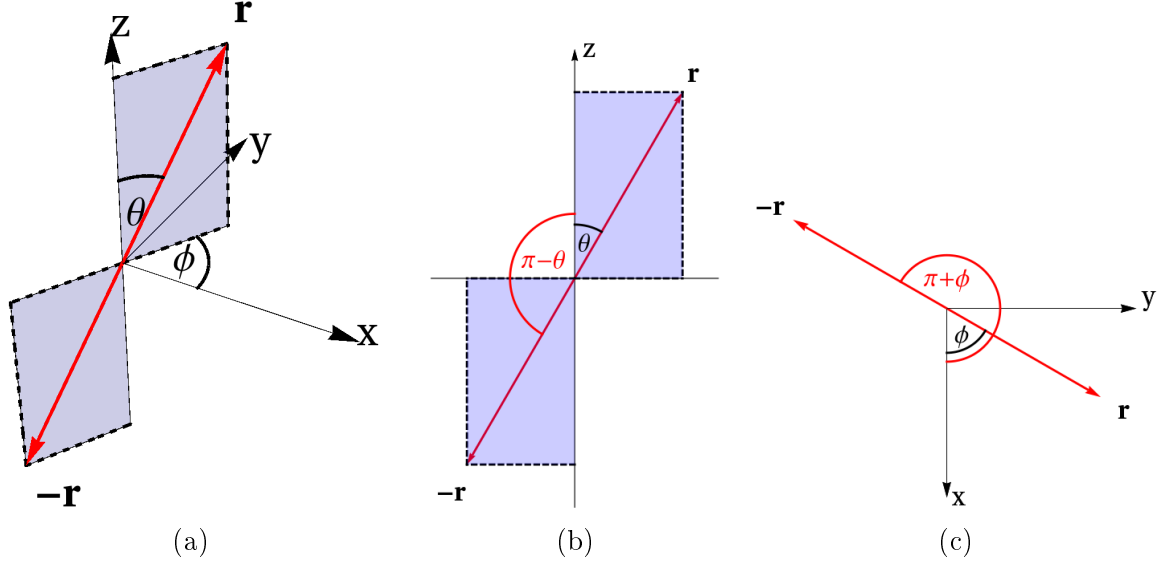


65. ábra. Az $\mathbf{L}$ pszeudovektorként viselkedik

Tekintsük most a pályaimpulzusmomentum sajátfüggvényeit, amelyek alakja

$$\mathcal{R}(r) Y_\ell^m(\theta, \phi), \quad (36.6)$$

ahol $\mathcal{R}(r)$ tetszőleges, csak $r = |\mathbf{r}|$ -től függő függvény $Y_\ell^m(\theta, \phi)$ pedig egy gömbfüggvény. Világos, hogy $\Pi\mathcal{R}(r) = \mathcal{R}(r)$, mert a helyvektor hossza $r = |\mathbf{r}|$ nem változik tükrözéskor, tehát a fenti függvény $\mathcal{R}(r)$ radiális része páros. Most megmutatjuk, hogy a szögektől függő rész is határozott paritású, azaz a Π -nek sajátfüggvénye. Tükrözzük ehhez az $\mathbf{r}$ vektort az origóra, és nézzük meg mi történik a polár- illetve az azimutiszöggel. Belátható geometriai okoskodással (lásd a 36.2 ábrán),



66. ábra. A polár- illetve az azimutiszög változása az $\mathbf{r}$ vektor origóra való tükrözésekor. A változás a (b) ábrán az $\mathbf{r}$ - z síkra merőleges irányból nézve, a (c)-n pedig a z tengely irányából nézve látható.

vagy a (35.3) kifejezésében végrehajtott helyettesítéssel algebrai úton, hogy az $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ transzformációnak a

$$\theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \phi \rightarrow \phi + \pi \quad (36.7)$$

transzformáció felel meg. Tekintsük most egy adott ℓ esetén a legnagyobb m -hez, azaz az $m = \ell$ -hez tartozó $Y_\ell^\ell(\theta, \phi) = \sin^\ell \theta e^{i\ell\phi}$ gömbfüggvényt (a normálási tényező itt nem játszik szerepet) és hajtsuk végre a fenti helyettesítéseket a szögekben:

$$\Pi \sin^\ell \theta e^{i\ell\phi} = \sin^\ell(\pi - \theta) e^{i\ell(\phi + \pi)} = (-1)^\ell \sin^\ell \theta e^{i\ell\phi}. \quad (36.8)$$

Azaz a függvény páros vagy páratlan attól függően, hogy ℓ páros vagy páratlan. Tekintsük most a ΠL_- operátort, ahol L_- a lefelé léptető operátor. Mivel L_- az $\mathbf{L}$ vektor komponenseinek összege ($L_- = L_x - iL_y$) ezért maga is páros:

$$\Pi L_- = L_- \Pi, \quad (36.9)$$

amiről közvetlenül is meggyőződhetünk, ha a (35.14)-en végrehajtsuk a (36.7) transzformációt. Ez igaz L_- minden k -adik hatványára is, s így $L_-^k Y_\ell^\ell(\theta, \phi) = Y_\ell^{\ell-k}(\theta, \phi)$ is $(-1)^\ell$ paritású. Kicsit részletesebben, legyen $Y_\ell^m(\theta, \phi) = c_{lm} L_-^{\ell-m} Y_\ell^\ell(\theta, \phi)$, ahol a c_{lm} számok az L_- operátor $(\ell - m)$ -szeres alkalmazása során föllépő, a (33.38) összefüggésből meghatározható, a normálást biztosító számok szorzatai. Eszerint

$$\begin{aligned} \Pi Y_\ell^m(\theta, \phi) &= c_{lm} \Pi L_-^{\ell-m} Y_\ell^\ell(\theta, \phi) = c_{lm} L_-^{\ell-m} \Pi Y_\ell^\ell(\theta, \phi) = \\ &= (-1)^\ell c_{lm} L_-^{\ell-m} Y_\ell^\ell(\theta, \phi) = (-1)^\ell Y_\ell^m(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (36.10)$$

Tehát m -től függetlenül

$$\Pi Y_\ell^m(\theta, \phi) = (-1)^\ell Y_\ell^m(\theta, \phi), \quad (36.11)$$

azaz a paritást az ℓ mellékkvantumszám paritása határozza meg.

36.3 Feladat: Számítsuk ki $\mathbf{L}$ és $\mathbf{R}$ komponenseinek kommutátorát.

36.4 Feladat: Számítsuk ki $\mathbf{L}$ és $\mathbf{P}$ komponenseinek kommutátorát.

36.5 Feladat: A fenti két feladat alapján indokoljuk meg, hogy $\mathbf{R}$ és $\mathbf{P}$ miért vektoroperátorok. Adjunk példát skalár operátorra.

37. Centrális erőter sajátértékproblémája, a radiális egyenlet

Centrális erőterben a Hamilton-operátor:

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(|\mathbf{R}|). \quad (37.1)$$

Itt a továbbiakban az $|\mathbf{R}| = R$, $|\mathbf{P}| = P$ jelölést használjuk.

Ennek megfelelően itt a

$$\left[\frac{P^2}{2m} + V(R) \right] |\psi\rangle = \varepsilon |\psi\rangle \quad (37.2)$$

sajátértékprobléma megoldását keressük. Megmutatható, hogy L^2 és L_z is fölcserélhető ezzel a H -val, mert H csak skalároktól függ.

37.1 Feladat: Mutassuk meg, hogy L^2 és L_z is fölcserélhető a fenti (37.1) Hamilton-operátorral.

A fölcserélhetőség miatt kereshetjük majd H , L^2 és L_z közös sajátvektorait.

Most kifejezzük L^2 -el $\mathbf{P}^2$ -et.

A klasszikus mechanikában az $\mathcal{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ miatt láthatóan $\mathcal{L}^2 = r^2 p^2 \sin^2 \alpha = r^2 p^2 (1 - \cos^2 \alpha) = r^2 p^2 - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2$, ahol α az $\mathbf{r}$ és $\mathbf{p}$ által bezárt, általában időben változó szög, $(\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})$ pedig a két háromdimenziós vektor közösleges skaláris szorzatát jelzi. Eszerint klasszikusan

$$p^2 = (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2 / r^2 + \mathcal{L}^2 / r^2 = p_r^2 + \mathcal{L}^2 / r^2. \quad (37.3)$$

A kvantummechanikában viszont, mivel $\mathbf{R}$ és $\mathbf{P}$ komponensei nem cserélhetők föl, egy $\hbar$ nagyságrendű korrekciós tag is föllép, a megfelelő operátorok között az

$$\mathbf{L}^2 = (\mathbf{R} \times \mathbf{P})^2 = \mathbf{R}^2 \mathbf{P}^2 - (\mathbf{R} \cdot \mathbf{P})^2 + i\hbar \mathbf{R} \cdot \mathbf{P} \quad (37.4)$$

összefüggés adódik. Ennek belátásához vegyük figyelembe, hogy $\mathbf{L}^2 = L_i L_i = (\epsilon_{ijk} X_j P_k)(\epsilon_{iln} X_l P_n)$, ahol a kétszer előforduló indexekre összegezni kell. Kihasználva továbbá az $\epsilon_{ijk}\epsilon_{iln} = \delta_{jl}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{kl}$ összefüggést, kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} L_i L_i &= X_j P_k X_j P_k - X_j P_k X_k P_j = X_j (X_j P_k - i\hbar \delta_{jk}) P_k - \\ &\quad - X_j (X_k P_k - 3i\hbar) P_j = \\ &= X_j X_j P_k P_k - i\hbar \delta_{jk} X_j P_k - X_j X_k P_j P_k + 3i\hbar X_j P_j = \\ &= X_j X_j P_k P_k + 2i\hbar X_j P_j - X_j (P_j X_k + i\hbar \delta_{jk}) P_k = \\ &= X_j X_j P_k P_k - X_j P_j X_k P_k + i\hbar X_j P_j. \end{aligned}$$

S ez éppen a (37.4) egyenlőség koordinátákkal fölírva. (37.4)-ből

$$\mathbf{P}^2 = \frac{1}{\mathbf{R}^2} [(\mathbf{R} \cdot \mathbf{P})^2 - i\hbar \mathbf{R} \cdot \mathbf{P}] + \frac{1}{\mathbf{R}^2} \mathbf{L}^2. \quad (37.5)$$

Áttérünk koordinátareprezentációba $\mathbf{R} \rightarrow \mathbf{r}$, $\mathbf{P} \rightarrow -i\hbar\nabla$ és gömbi koordinátákra: $\mathbf{r} = \mathbf{e}_r r$, $\mathbf{P} = -i\hbar\nabla = -i\hbar(\hat{\mathbf{e}}_r \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\mathbf{e}}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\mathbf{e}}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi})$. Ebből $\mathbf{R} \cdot \mathbf{P} = -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r}$. A $\mathbf{P}^2$ koordinátareprezentációjában gömbi koordinátákban így

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^2 &= \frac{1}{r^2} \left[\left(-i\hbar r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 - \hbar^2 r \frac{\partial}{\partial r} \right] - \hbar^2 \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\phi} = \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\phi} \right) = -\hbar^2 \Delta_{r\theta\phi} = -\hbar^2 \Delta \end{aligned} \quad (37.6)$$

alakú. Mindez természetes megvilágításba helyezi azt a korábbi (35.17) eredményünket is, hogy az impulzusnyomaték négyzetének operátora koordinátareprezentációban és gömbi koordinátákban (a $-\hbar^2$ faktortól eltekintve) éppen a Laplace-operátor szögektől függő részével egyezik meg. Ugyanis egyrészt $\mathbf{P} \rightarrow -i\hbar\nabla$ miatt $\mathbf{P}^2 = -\hbar^2 \Delta$, másrészt (37.5) szerint a $\mathbf{P}^2$ radiális része a szögletes zárójelben található operátor, az $\frac{1}{\mathbf{R}^2} \mathbf{L}^2$ -ben tehát a Laplace szögektől függő részének kell szerepelnie, s ugyanez látható a (37.6) koordinátareprezentációban kiírt alakból is.

37.2 Feladat: Bizonyítsuk be, hogy $-\hbar^2(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}) = (-i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r)^2 = [\frac{1}{2}(\frac{\mathbf{R}}{R} \mathbf{P} + \mathbf{P} \frac{\mathbf{R}}{R})]^2 = P_r^2$.

37.3 Feladat: A P_r operátor önadjungált, amit bizonyítsunk koordinátareprezentációban is.

A (37.2) egyenlet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) + V(r) \psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi(\mathbf{r}) \quad (37.7)$$

koordinátareprezentációs alakját gömbi koordinátákban fogjuk megoldani. Szeparáljuk a radiális és a szögektől függő részt a

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \hbar^2 \frac{1}{2m} \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\phi} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = \varepsilon \psi(r, \theta, \varphi) \quad (37.8)$$

sajátérték-egyenletben a

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \mathcal{R}(r) Y_\ell^m(\theta, \phi) = \frac{u(r)}{r} Y_\ell^m(\theta, \phi) \quad (37.9)$$

föltevéssel. Az $\mathcal{R}(r)$ függvényre kapható

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \mathcal{R}(r) + \hbar^2 \frac{1}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \mathcal{R}(r) + V(r) \mathcal{R}(r) = \varepsilon \mathcal{R}(r) \right] \quad (37.10)$$

egyenletet *radiális egyenletnek* nevezzük, ebből nyerjük az $u(r) = r\mathcal{R}(r)$ -re vonatkozó

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u(r) + V(r) u(r) = \varepsilon u(r) \quad (37.11)$$

közönséges differenciálegyenletet, amelyet szintén szokás radiális egyenletnek nevezni.

37.4 Feladat: Mutassuk meg, hogy $u(r)$ -re valóban a fenti (37.11) differenciálegyenlet adódik.

Ennek alakja az $u(r)$ függvényre olyan, mint egy egydimenziós problémára vonatkozó energiasajátérték-egyenlet, csak a valódi potenciál helyett a $V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$ effektív potenciál szerepel benne. A $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$ neve *centrifugális potenciál*, ez analóg a klasszikus mechanikában is megjelenő $\mathcal{L}^2/2mr^2$ potenciállal.

38. A radiális egyenlet megoldásainak aszimptotikus viselkedése

38.1. Aszimptotikus viselkedés $r \rightarrow \infty$ esetén

Ha $V(\infty) \rightarrow 0$, akkor $r \rightarrow \infty$ esetén a potenciális energia tagot és a centrifugális energiát elhagyhatjuk, s így a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} = \varepsilon u \quad (38.1)$$

egyenletet kapjuk. Ezt

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon u = 0 \quad (38.2)$$

alakba írva, fölismerjük, hogy ez egy ismert differenciálegyenlet, amelynek megoldásai $\sin kr$ és $\cos kr$, ha $\frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon = k^2$ értéke pozitív. Mivel ezek a függvények nem négyzetesen integrálhatóak, ezért ezek az $\varepsilon > 0$ energiához tartozó megoldások az úgynevezett *szórási állapotok* (lásd 15. fejelet) leírására alkalmasak. Ugyanez a helyzet, ha $\varepsilon = 0$, mert a megoldás ekkor lineáris függvény, amely szintén nem négyzetesen integrálható.

Kötött állapotnak nevezett, négyzetesen integrálható megoldásokat csak akkor kapunk, ha $\varepsilon < 0$. Ekkor a

$$0 < -\frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon =: \kappa^2 \quad (38.3)$$

jelölést szokás alkalmazni. A fönti (38.2) egyenlet két alkalmas lineárisan független megoldása ekkor $e^{\kappa r}$ és $e^{-\kappa r}$, amelyek közül a $\kappa > 0$ miatt csak az utóbbi négyzetesen integrálható. A hullámfüggvény aszimptotikus viselkedése a ∞ -ben, kötött állapotok esetén tehát

$$u(r \rightarrow \infty) \sim e^{-\kappa r}. \quad (38.4)$$

38.2. Aszimptotikus viselkedés a 0 környezetében

Tegyük föl, hogy a $V(r)$ potenciális energia az $r = 0$ közelében véges marad, vagy ha ∞ -hez is tart, az nem gyorsabb, mint ahogyan $1/r^2$ tart a ∞ -be a 0 körül. Ez utóbbi osztályba tartozik a Coulomb-típusú potenciál, amely az origóban $1/r$ rendben divergál, de lassabban mint $1/r^2$. Ekkor a (37.11) radiális egyenletben a 0 körül a potenciális energiát elhagyhatjuk a centrifugális energia tag mellett, és ugyancsak elhagyhatjuk az εu tagot is. Így a

$$\frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u = 0 \quad (38.5)$$

másodrendű lineáris egyenletet kapjuk, amelynek két megoldása $r^{\ell+1}$ és $1/r^\ell$.

38.1 Feladat: Keressük a (38.5) egyenlet megoldását r^ℓ alakban.

38.2 Feladat: Bizonyítsuk be, hogy $1/r^\ell$, ha $\ell \neq 0$, akkor nem négyzetesen integrálható a $(0, \infty)$ intervallumon.

Az $1/r^\ell$ alakú megoldás azonban a 0 körüli viselkedése miatt nem lesz négyzetesen integrálható, kivéve az $\ell = 0$ esetet.

De ez utóbbi sem engedhető meg, mert ekkor a 0 közelében $\mathcal{R}(r) = \frac{u(r)}{r} \sim \frac{1}{r}$ lenne amelyre alkalmazva a kinetikus energiában szereplő Δ -t az eredmény a $\delta(\mathbf{r})$ Dirac-deltával lenne arányos úi. $\Delta \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r})$ (amint az pl. az elektrosztatikából ismert, hiszen ez egy pontszerű töltés $\delta(\mathbf{r})$ sűrűségéhez tartozó ismert $\frac{1}{4\pi r}$ potenciált adja a Poisson-egyenletnek megfelelően). A kinetikus energiából ily módon adódó $\delta(\mathbf{r})$ -nek megfelelő szingularitást csak a potenciális energia kompenzálhatná a sajátérték-egyenletben, abban az esetben, ha az is hasonlóan szinguláris lenne, azaz a $V(r) \sim \delta(\mathbf{r})$ esetben. De kikötöttük, hogy a potenciális energia $1/r^2$ -nél kevésbé szinguláris a 0

körül, tehát ilyen esetben az $\mathcal{R}(r) = 1/r$ sem jöhet szóba. Azaz az u függvényre a 0 körül a fentebb előírt viselkedésű potenciál esetén csak a nemszinguláris $r^{\ell+1}$ -el arányos viselkedés lehet jó. Tehát

$$u(r \rightarrow 0) \sim r^{\ell+1}, \quad (38.6)$$

amiből az is látszik, hogy nulla körül a hullámfüggvény radiális része

$$\mathcal{R}(r) = u(r)/r \sim r^{\ell}, \quad (38.7)$$

azaz nullához tart, ha $\ell \neq 0$, és véges ha $\ell = 0$.

Még fölírjuk a teljes radiális egyenletet kötött állapotok keresése esetén a fent bevezetett κ -val:

$$\frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) u = -\frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon u = \kappa^2 u. \quad (38.8)$$

Itt célszerű bevezetni a $\kappa r = \varrho$ dimenziótlán változót, amellyel az u -ra vonatkozó egyenlet azon alakja, amelyet kötött állapotok, tehát $\varepsilon < 0$ esetén használunk:

$$\left(\frac{d^2}{d\varrho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\varrho^2} - \frac{V(\varrho/\kappa)}{|\varepsilon|} - 1 \right) u(\varrho) = 0, \quad (38.9)$$

ahol a föntiek szerint $u(\varrho \rightarrow 0) \sim \varrho^{\ell+1}$ és $u(\varrho \rightarrow \infty) \sim e^{-\varrho}$.

Ezt a radiális egyenletet gyakran használják az atomfizikában, azonban a megoldása zárt, analitikus alakban csak néhány speciális alakú $V(r)$ potenciális energia esetén lehetséges. Megoldására ezért általában numerikus módszereket alkalmaznak. Viszont az egyik legalapvetőbb potenciális energia, a Coulomb-féle $1/r$ -el arányos potenciál esetén a megoldásokat analitikusan, elemi függvények segítségével is meg lehet határozni. Ezzel a nagyon fontos esettel foglalkozunk a következő szakaszban.

39. Vonzó Coulomb-potenciál sajátértékproblémája, kötött állapotok

Vonzó Coulomb-erő esetén a potenciális energia:

$$V(r) = -\frac{\gamma}{r}, \quad (39.1)$$

ahol $\gamma > 0$. Ilyen a potenciális energiája a hidrogénatomban (H-atom) a proton terében mozgó elektronnak, ahol $\gamma = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} q_0^2 =: e_0^2$, ahol q_0 az elemi töltést jelenti. Az úgynevezett hidrogénszerű ionok esetén, amelyek magjában Z számú proton tart kötve egyetlen elektront: $\gamma = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} Z q^2$. A hidrogénszerű ionokra példa az egyszer ionizált hélium: He^+ ($Z = 2$), a kétszer ionizált Li^{++} ($Z = 3$), stb. A megoldandó sajátérték-egyenlet ebben az esetben

$$\left(\frac{P^2}{2m} - \frac{\gamma}{R} \right) |\psi\rangle = \varepsilon |\psi\rangle. \quad (39.2)$$

A kötött állapotokra, tehát az előző szakasz eredménye szerint a negatív ε -okra szorítkozunk. Átérve koordinátareprezentációra és gömbi koordinátákra, az előző szakasz szerint, a ψ energiasajátfüggvényt a

$$\psi(r, \theta, \phi) = \mathcal{R}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \phi) = \frac{u(r)}{r} Y_{\ell}^m(\theta, \phi) \quad (39.3)$$

alakban kereshetjük, ahol a

$$\sqrt{-\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} r = \kappa r = \varrho \quad (39.4)$$

jelöléssel most az $u(\varrho)$ -ra vonatkozó

$$\left(\frac{d^2}{d\varrho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\varrho^2} + \frac{2m\gamma}{\hbar^2\kappa} \frac{1}{\varrho} - 1 \right) u(\varrho) = 0 \quad (39.5)$$

egyenletet kell megoldanunk. Vezessük be a

$$\varrho_0 = \frac{2m\gamma}{\hbar^2\kappa} \quad (39.6)$$

újabb dimenziótlan változót, ekkor az egyenlet

$$\left(\frac{d^2}{d\varrho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\varrho^2} + \frac{\varrho_0}{\varrho} - 1 \right) u(\varrho) = 0 \quad (39.7)$$

alakú. A megoldást az előző szakaszban vizsgált aszimptotikus viselkedés alapján az

$$u(\varrho) = \varrho^{\ell+1} w(\varrho) e^{-\varrho} \quad (39.8)$$

alakban keressük, ahol a $\varrho^{\ell+1}$ tényező biztosítja a helyes aszimptotikus alakot a 0 körül, az $e^{-\varrho}$ faktor a ∞ körül, a $w(\varrho)$ keresendő függvény pedig azt, hogy az $u(\varrho)$ fönti alakja az egyenlet pontos megoldása legyen. Behelyettesítve u ezen (39.8) alakját a (39.7) egyenletbe, w -re a következő differenciálegyenletet kapjuk:

$$\varrho \frac{d^2 w}{d\varrho^2} + 2(\ell+1-\varrho) \frac{dw}{d\varrho} + (\varrho_0 - 2(\ell+1))w = 0. \quad (39.9)$$

A $w(\varrho)$ -nak ezen kívül még olyannak is kell lennie, hogy ne rontsa el az (39.8) formulával már előírt aszimptotikus alakokat, azaz $w(\varrho)$ -nak a 0 körül hatványsorba fejthetőnek kell lennie (egyébként a 0 körüli viselkedést elrontaná), másrészt a végtelenben csak lassabban nőhet mint e^ϱ . Keressük tehát $w(\varrho)$ -t a

$$w(\varrho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \varrho^k \quad (39.10)$$

alakú hatványsor formájában. Beírva ezt a (39.9) egyenletbe, abból a föltételből, hogy w megoldás minden ϱ -ra, a sor együtthatóira egy rekurziós formula adódik:

$$a_{k+1} = \frac{2(k+\ell+1) - \varrho_0}{(k+1)(k+2\ell+2)} a_k. \quad (39.11)$$

Most megmutatjuk, hogy amennyiben a (39.10) összeg, azaz a sor, végtelen lenne, a rekurziós formulából az következne, hogy az $u(\varrho)$ aszimptotikus alakja elromlana, abban az értelemben, hogy $u(\varrho \rightarrow \infty) \sim e^{-\varrho}$ helyett $u(\varrho \rightarrow \infty) \sim e^\varrho$ állna fönn, azaz a függvényünk nem lenne négyzetesen integrálható. Valóban, nagy k -ra ($k \gg \ell, \varrho_0$) a fönti sor együtthatói között közelítőleg az $a_{k+1} = \frac{2}{k} a_k$ rekurziós formula áll fönn, ez utóbbi pedig az $e^{2\varrho}$ végtelen sorának tulajdonsága. Ha tehát a (39.11) rekurziós összefüggéssel adott sor végtelen lenne, akkor az nagy k -k s így nagy ϱ -k esetén elrontaná az előírt $e^{-\varrho}$ jellegű aszimptotikus viselkedést. Emiatt a (39.10) sornak végesnek kell maradnia, azaz létezik egy olyan n_r , amelynél $a_{n_r} \neq 0$, de $a_{n_r+1} = 0$, s ekkor (39.11)-ből következően az összes n_r -nél nagyobb indexű a_k is eltűnik, vagyis a sor egy n_r -ed fokú polinommal redukálódik. Ez úgy és csak úgy lehetséges, ha (39.11) jobb oldalán a tört számlálója eltűnik, azaz

$$\varrho_0 = 2(n_r + \ell + 1). \quad (39.12)$$

A w polinom fokszámát megadó n_r szám neve *radiális kvantumszám*. Most vezessük be az

$$n := n_r + \ell + 1 \quad (39.13)$$

definícióval a *főkvantumszámot*, amely szükségképpen pozitív egész szám. Az elnevezés oka, hogy ez a szám határozza meg az energiasajátértékeit. A (39.6) definíció alapján ugyanis

$$\varrho_0 = \frac{2m\gamma}{\hbar^2\kappa} = 2n,$$

amiből $\kappa = \frac{m\gamma}{\hbar^2} \frac{1}{n}$. Eszerint $\varepsilon = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{\gamma^2 m}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$, s így a $\gamma = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} Zq^2 =: Ze_0^2$ definícióval, a Coulomb-potenciálnak megfelelő energiasajátértékek a következők:

$$\varepsilon_n = -\frac{mZ^2e_0^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

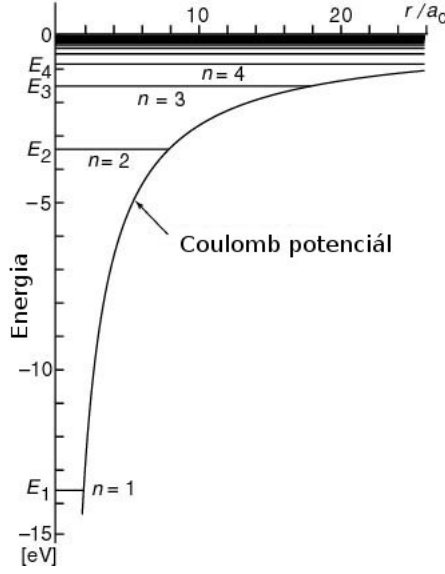
Ezek a vonzó Coulomb-potenciálhoz tartozó energiasajátértékek tehát diszkrét (ez a kötött állapotokra jellemző) és igen jó közelítéssel visszaadják a H-atom spektrumának ($Z = 1$) kísérletileg talált elsődleges szerkezetét, a Lyman-, Balmer-, stb sorozatokat. Az eredmény megegyezik a Bohr-modellből kapható formulával, ám a Bohr-modell csak erre az esetre, azaz a Coulomb-potenciálra jó, a kvantummechanikai eljárás viszont általánosan mindenfajta potenciál esetén helyes eredményt ad. Megjegyezzük, hogy az energiasajátértékek fönti diszkrét spektrumát a határföltételek teljesítésének követelménye alapján kaptuk meg.

40. A hidrogénatom elsődleges spektruma

Az előző szakaszban kapott eredmény a $Z = 1$ esetben megadja a H-atom spektrumának elsődleges szerkezetét. A különféle finomításokról alább esik szó. Az $\frac{me_0^4}{2\hbar^2}$ energiaértéket – amely $2,2 \times 10^{-18} \text{ J}$, illetve $13,6 \text{ eV}$ – nevezik 1 *Rydberg*-nek. A H-atom kötött stacionárius állapotainak energiái tehát

$$\varepsilon_n = -\frac{1}{n^2} Ry \quad (40.1)$$

értékűek, ahol n a főkvantumszám. Az előző szakasz eredményéből következően $n = n_r + \ell + 1$, ahol n_r egy polinom fokszáma, tehát egy nemnegatív egész, másrészt tudjuk, hogy, ℓ a mellékkvantumszám is nemnegatív egész $\ell = 0, 1, 2, \dots$. Ebből következik, hogy n lehetséges értékei a pozitív egész számok. A legmélyebb energiájú állapot, vagy másnéven alapállapot energiája -1 Ry , ahhoz az állapothoz képest amikor az elektront a magtól a végtelenbe a 0 potenciálú helyre távolítjuk, úgy, hogy ott a kinetikus energiája is még nulla marad. Minimálisan tehát 1 Ry energia kell ahhoz, hogy az elektront elszakítsuk a protontól, azaz 1 Ry a H-atom ionizációs energiája. n növelésével a gerjesztett állapotok energiáit kapjuk, amelyek gyorsan közelednek a 0 energiához, azaz az ionizált állapot felé.



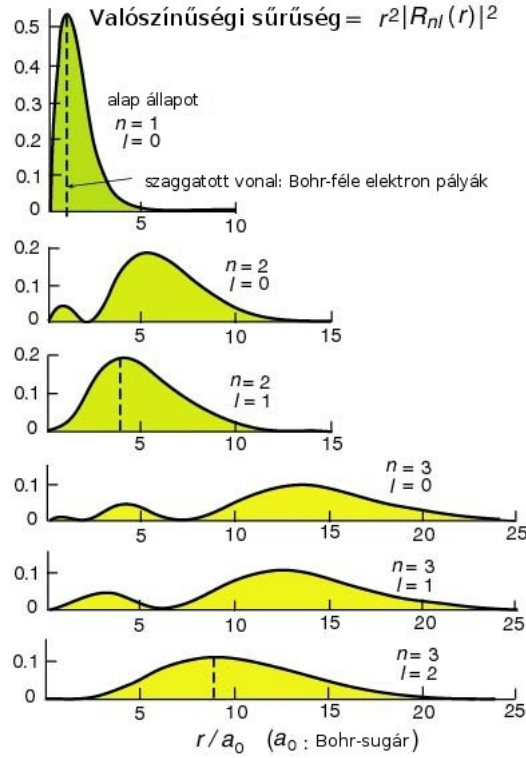
67. ábra. A H-atom stacionárius állapotainak energiái

Megjegyezzük, hogy a spektrumnak van folytonos része is, ugyanis minden $\varepsilon > 0$ pozitív sajátértékhez is tartoznak sajátállapotai a probléma (39.2)-ben megadott H Hamilton-operátorának. Ezeket szokás szórási, vagyis nem kötött sajátállapotoknak nevezni (lásd 15. fejelet). Ezek írják le azt a szituációt, amikor egy részecske, pl. elektron, a végtelenből érkezik szóródik egy centrum pl. atommag által létrehozott potenciálon, majd ismét a végtelenbe távozik valamilyen irányban. A kvantummechanika segítségével ki lehet számítani, hogy milyen irányba mekkora amplitúdóval, illetve valószínűséggel szóródik a részecske. A szórási állapotok, illetve az azoknak megfelelő hullámfüggvények meghatározásával azonban itt nem foglalkozunk.

Az előző szakaszban a kötött állapotokhoz tartozó energiasajátértékek mellett valójában a sajátvektorokat, illetve mivel koordinátareprezentációt használtunk, a sajátfüggvényeket is megadtuk. A radiális egyenletnek adott n esetén n lineárisan független megoldása van, mivel adott n esetén az $n = n_r + \ell + 1$ egyenlőség miatt az $n_r = 0, \ell = n - 1; n_r = 1, \ell = n - 2; \dots n_r = n - 1, \ell = 0$; értékeknek más-más polinom felel meg. Ezeket rendszerint az n és az ℓ értékével indexelik, s így a sajátfüggvények radiális része az előzőek szerint adott n esetén az n számú $\mathcal{R}_{n\ell}(r) = u_{n\ell}(\kappa r)/r$ függvény. Mivel

$$\mathcal{R}_{n\ell}(r) = \frac{u_{n\ell}(\kappa r)}{r} = \frac{(\kappa r)^{\ell+1}}{r} w_{n_r}(\kappa r) e^{-\kappa r}, \quad (40.2)$$

ahol $w_{n_r}(\kappa r)$ egy n_r -ed fokú polinom, az $\mathcal{R}_{n\ell}(r)$ függvény egy $n_r + \ell = n - 1$ fokszámú polinom és az $e^{-\kappa r}$ függvény szorzata.



68. ábra. Az ábrák az elektron magtól mért távolságának valószínűségi sűrűségét mutatják az egyes állapotokban. $(r^2|\mathcal{R}_{nl}(r)|^2)$

A szögektől függő részt is figyelembe véve, a sajátfüggvények alakja

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \frac{u_{nl}(\kappa r)}{r} Y_{\ell}^m(\theta, \varphi). \quad (40.3)$$

Adott n esetén így a lineárisan független, sőt ortogonális sajátfüggvények száma, az adott ℓ értékhez tartozó $2\ell + 1$ számú lehetséges m értéket, azaz különböző gömbfüggvényt is figyelembe véve:

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2. \quad (40.4)$$

Az n főkvantumszámhoz tartozó eneriasajátérték ezek szerint n^2 -szeresen elfajult. Valójában azonban – mint tudjuk – az elektronnak van még egy belső szabadsági foka, a sajátimpulzusnyomatéka, másnéven a spinje, amelyre $j = s = 1/2$. A megfelelő mágneses spinquantumszám m_s két értéket vehet föl $\pm 1/2$, és ez a két állapot is ortogonális. Emiatt az elfajulás valójában $2n^2$ -szeres. Másképpen ez azt jelenti, hogy a H, L^2, L_z, S_z itt egy CSCO-t alkot. Az ezeknek megfelelő kvantumszámok, amelyek az állapotot már egyértelműen megadják: n, ℓ, m, m_s .

A (39.8) sajátfüggvény radiális részében szereplő $\varrho = \kappa r$ változóban a κ értékét a fentiek figyelembe vételével beírva, a $Z = 1$ esetén $\kappa_n = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \frac{me_0^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}} = \frac{me_0^2}{\hbar^2} \frac{1}{n}$ a

$$\varrho = \frac{1}{n} \frac{r}{a_0} \quad (40.5)$$

kifejezést kapjuk, ahol az

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me_0^2} \quad (40.6)$$

hosszúság dimenziójú mennyiség neve a Bohr-sugár. Az energiasajátértékeket ezzel kifejezve az

$$\varepsilon_n = -\frac{e_0^2}{2a_0} \frac{1}{n^2} \quad (40.7)$$

eredmény adódik, melynek egy további fölírási módja:

$$\varepsilon_n = -\frac{mc^2}{2} \alpha^2 \frac{1}{n^2}, \quad (40.8)$$

ahol mc^2 az elektron nyugalmi energiája és

$$\alpha = \frac{e_0^2}{\hbar c} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,04} \quad (40.9)$$

(itt q az elektron töltése Coulombban mérve) egy dimenziótlan szám, amelyet Sommerfeld vezetett be és *finomstruktúra állandónak* nevezzük. Az elnevezés arra utal, hogy a H-atom energiaszintjeinek finomabb szerkezetét, amely elsősorban relativisztikus eredetű korrekciókat tartalmaz az elsődleges szerkezethez képest, az α állandó határozza meg. Erről alább még szólunk.

Az energiaspektrumnak és a sajátfüggvényeknek a fönt látott módszerrel történő meghatározása Schrödinger nevéhez fűződik (1926). A történeti hűség kedvéért viszont jegyezzük meg, hogy a spektrumot ugyanebben az évben de néhány hónappal korábban W. Pauli is megkapta egy ahhoz hasonló, de annál bonyolultabb algebrai módszerrel, ahogyan az impulzusmomentum 33. szakaszban tárgyalt általános elméletében a J^2 és a J_z sajátértékeit és közös sajátvektorait meghatároztuk.

A sajátfüggvények explicit alakját megtalálhatjuk számos könyvben vagy az interneten pl. az alábbi címen

<http://panda.unm.edu/courses/finley/P262/Hydrogen/WaveFcns.html>

Itt csak az alapállapot *normált* hullámfüggvényét adjuk meg, melynek alakja

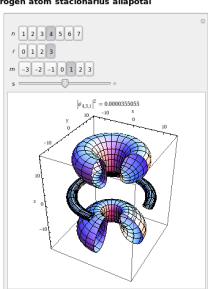
$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-r/a_0}. \quad (40.10)$$

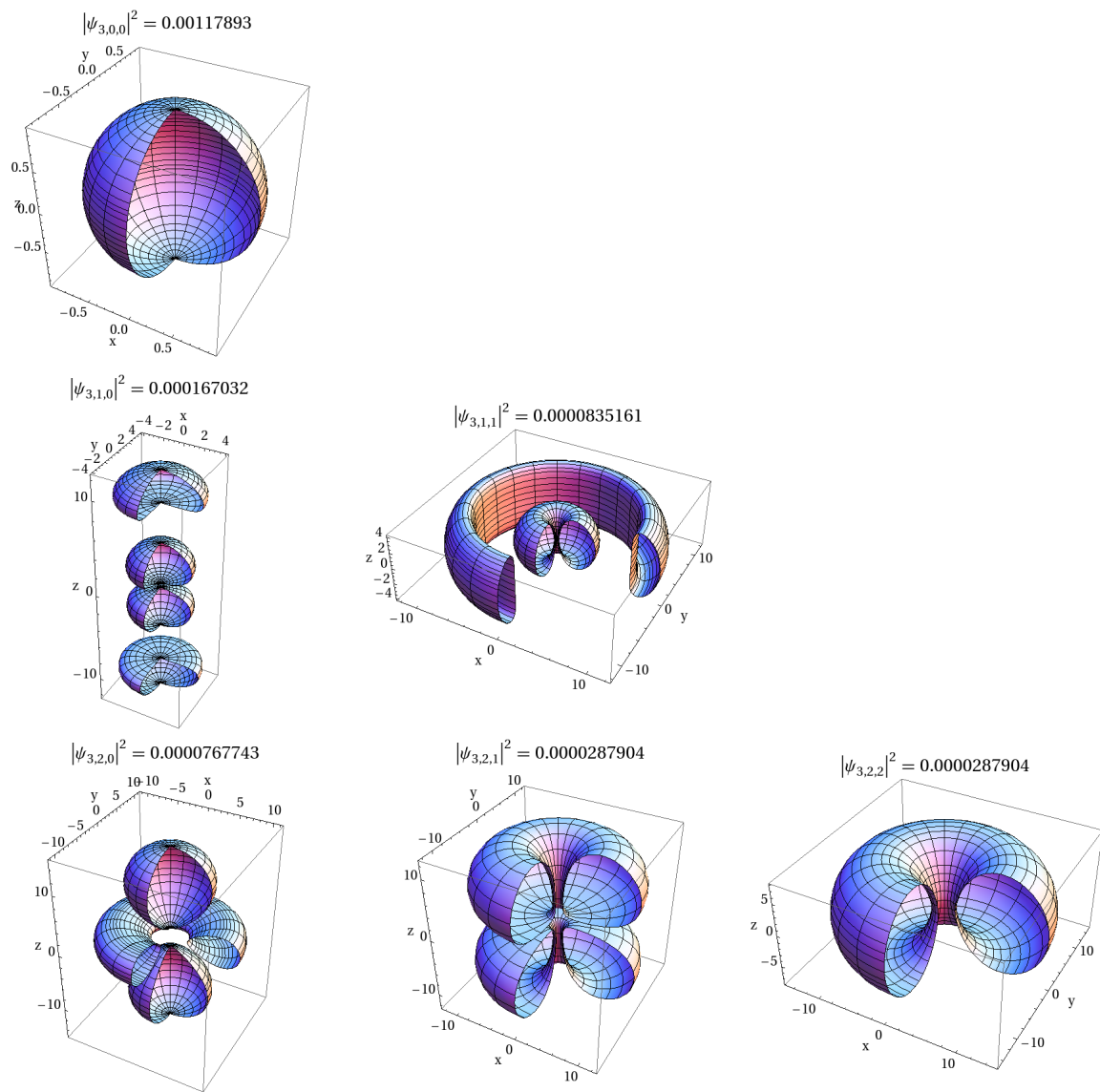
Ez egy gömbszimmetrikus állapot, azaz nem függ a θ, ϕ szögektől. Adott n, ℓ számpárokhoz tartozó ψ_{nlm} állapotok együttesét *héjaknak*, a mellékkvantumszám értéke szerint pedig az $\ell = 0, 1, 2, 3$ értékeknek megfelelő hullámfüggvényeket rendre az *s, p, d, f pályáknak* szokás nevezni. Egy másfajta terminológia szerint az $n = 1$ állapot neve *K* héj, az $n = 2$ az *L* héj, $n = 3$ az *M* héj. Az egyes pályák térbeli struktúráját viszonylag jól szemléltetik a

<http://www.orbitals.com/orb/orbtable.htm>

címen megtekinthető ábrák, ahol a piros szín a függvény pozitív a kék a negatív értékét jelzi. Az egyes állapotokat, pályákat a főkvantumszám és a mellékkvantumszám megadásával jelöljük, az n értékét a megfelelő számmal, ℓ értékét pedig a jelzett konvenció szerinti betűvel. Az alapállapot jele teh

át az *1s*, az első gerjesztett állapotok a *2s*, és *2p* pályák, ezután következnek a *3s, 3p, 3d* pályák, stb. Az eddig használt modellben (Coulomb-potenciál) az energia csak az n értékétől függ, a különböző ℓ -hez tartozó állapotok azonos energiájúak.

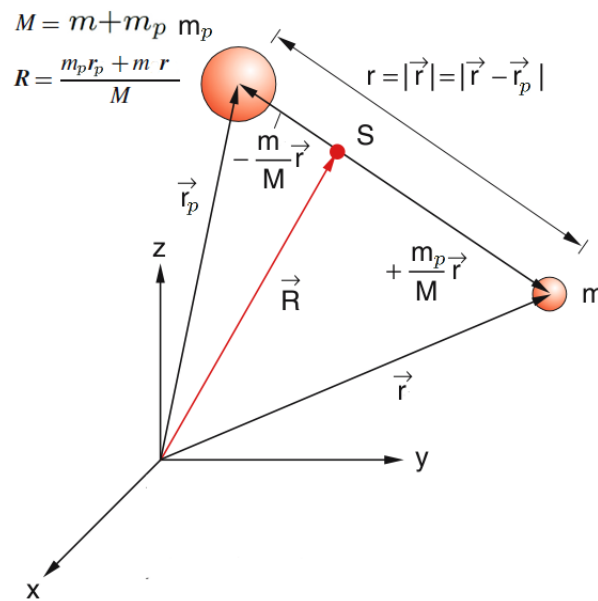
HIDROGÉNATOM STACIONÁRIUS ÁLLAPOTAI		
		Az ábra az elektron megtalálási valószínűségi sűrűségfüggvényének nívófelületeit mutatja a hidrogénatom valamely stacionárius állapotában. Az állapotot az n, l, m kvantumszámok beállításával választhatjuk ki.



69. ábra. Az elektron megtalálási valószínűségi sűrűségfüggvényének nívófelületei a hidrogénatom $n = 3$ főkvantumszámhoz tartozó stacionárius állapotaiban

A fentiekben már utaltunk rá, hogy a Coulomb-potenciálhoz tartozó (39.2) Hamilton-operátor a valódi hidrogénatomhoz tartozó Hamilton-operátornak csak egy jó közelítése, az ebből fontebb számított spektrumot nevezzük a H-atom elsődleges szerkezetének. Valójában azonban a (39.2) által nem tartalmazott további kölcsönhatások miatt a H-atom tényleges spektruma kissé különbözik a fenti egyszerű eredménytől. A részletek mellőzésével alább röviden felsoroljuk a megfelelő korrekciókat.

1. A H-atom valójában egy kéttest probléma, a proton tömege szigorúan véve nem végtelen. Viszonylag egyszerűen megmutatható, hogy a klasszikus mechanikához hasonlóan a tömegközéppont mozgása és a relatív mozgás szétválaszthatók. A fenti eredményeket ez annyiban befolyásolja, hogy az elektron m tömege helyett mindenütt az $m_r = \frac{mm_p}{m+m_p}$ redukált tömeget kell használni, ahol m_p a proton tömege. Mivel m_p sokkal (1837-szer) nagyobb az elektron tömegénél, ez lényegében alig okoz számszerű változást az eredményekben.

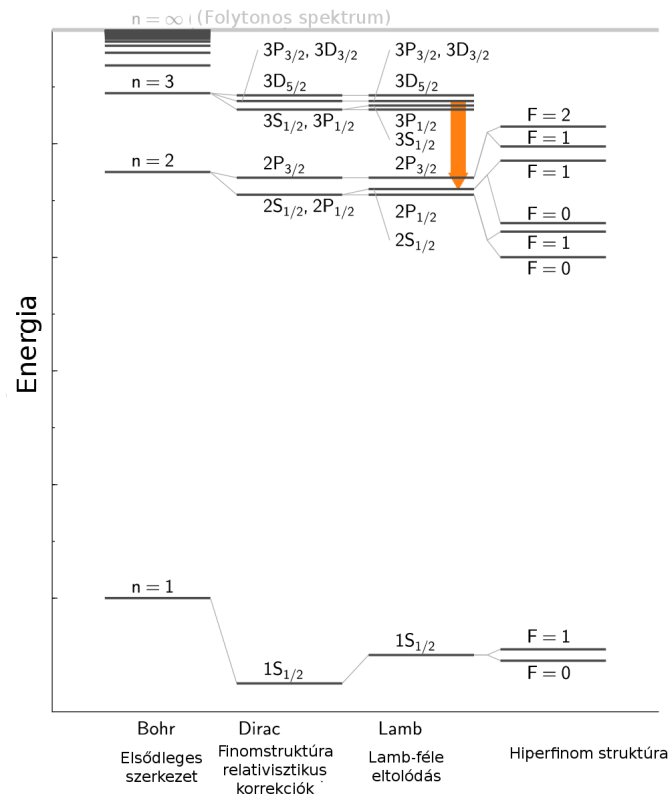


70. ábra. A tömegközépponti koordináták bevezetése

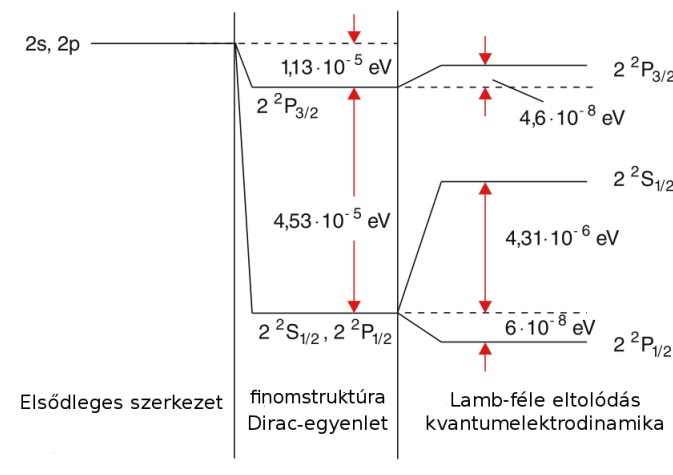
2. Relativisztikus korrekciók. Ezek az elsődleges szerkezetre kapott $1Ry$ nagyságú energiáknál $\alpha^2 \approx 0,53 \times 10^{-4}$ -szer kisebbek, de a degenerációt részben föloldják, azaz az elsődleges energianívók egy finomabb fölbontásban több egymáshoz közeli nívóra hasadnak föl. Ezt nevezzük *finomszerkezetnek*. Relativisztikus esetben ugyanis a H Hamilton-operátor a spintől is függ, és föllép az ún. spin-pálya kölcsönhatás. Ilyenkor a Hamilton-operátorral az elektron pályaimpulzusnyomatéka $\mathbf{L}$ és a spinje $\mathbf{S}$ (komponensenként) külön-külön már nem cserélhetők föl, ezek már nem mozgásállandók. A megmaradó mennyiség ebben az esetben a $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, a teljes impulzusnyomaték operátora. A $\mathbf{J}^2$ operátor $\hbar^2 j(j+1)$ sajátértékeiben szereplő j kvantumszámról ilyenkor megmutatható, hogy értéke $j = l + 1/2$ illetve $j = l - 1/2$ lehet, ez utóbbi csak akkor, ha $l \neq 0$. A megfelelő állapotot ilyenkor l_j -vel szokás jelölni, ahol az l helyére az s, p, d stb. betűk valamelyikét írjuk az $l = 0, 1, 2$ stb. pályáknak megfelelően. A spin-pálya kölcsönhatás miatt pl. a $p_{1/2}$ illetve a $p_{3/2}$ állapotokhoz tartozó energiák különböznek, mert ekkor az energia már függ j -től. Az energiakülönbség a $2p_{3/2}$ és a $2p_{1/2}$ nívók között kb. 10,9 GHz frekvenciának felel meg. A finomszerkezetnek a kísérleti értékekkel megegyező elméleti leírása a P. Dirac nevéhez fűződő relativisztikus egyenlet alapján lehetséges, amely az elektron spinjéről is első elvek alapján ad számot. A részleteket illetően az atomfizikai, illetve a további kvantummechanikai tanulmányokra utalunk. Érdeemes itt megjegyezni, hogy a finomszerkezet első elméleti leírása A. Sommerfeld nevéhez fűződik, aki a helyes magyarázattal szemben végül is hibásnak bizonyult értelmezéssel jutott mindazonáltal a kísérletekkel megegyező eredményre.

3. Az úgynevezett Lamb-féle eltolódás, amelyet először W. Lambnak sikerült megmérnie 1947-ben. Ez egy kvantumelektrodinamikai effektus, amit ugyancsak 1947-ben H. Bethe magyarázott meg elsőként számítással. Az eltolódás az atomot körülvevő "elektromágneses vákuum" kvantumos tulajdonságainak a következménye. Ennek következtében a $2s_{1/2}$ és a $2p_{1/2}$ állapotok energiája egy kissé különbözővé válik, annak ellenére, hogy a $j = 1/2$ értéke a két állapot esetén ugyanaz, s így a Dirac-elmélet szerint ezek azonos energiájúaknak adódnak. A Lamb-eltolódás nagyságrendje az elsődleges szerkezetnél $\alpha^3 |\ln \alpha| \approx 1,9 \times 10^{-6}$ -szor kisebb, az említett nívók esetén ez 1,057 GHz.

4. A hiperfinom struktúra, amely a mag spinjéhez és az elektron spinjéhez csatolódó mágneses nyomatékok kölcsönhatásából ered, és az $n > 1$ állapotokon a finomstruktúránál kb. 1000-szer kisebb. A hiperfinom kölcsönhatás az $n = 1$ alapállapotot is fölhasítja, ahol ennek mértéke 1420 MHz, jóval nagyobb, mint a gerjesztett állapotok esetén. Az ennek megfelelő 21 cm-es hullámhosszúságú elektromágneses sugárzás kibocsátását lehet megfigyelni a világűrbeli H-atomokon.



71. ábra. Korrekciók a H-atom spektrumához



72. ábra. A korrekciók nagyságrendje $n = 2$; $l = 1$ esetében

41. Többrészecske rendszerek és azonos részecskék

Egy-egy részecske állapotát a korábbiak szerint egy $\mathfrak{H}$ Hilbert-térbeli vektorral adjuk meg. Ha több különböző részecskénk van, akkor a leírásra ezen terek úgynevezett tenzori szorzatát használjuk, amely maga is egy Hilbert-tér. Ezt a következőképpen vezetjük be. Legyen $|\varphi\rangle \in \mathfrak{H}_1$ és $|\psi\rangle \in \mathfrak{H}_2$. Tekintsük először a $|\varphi\rangle|\psi\rangle$ alakú rendezett párok halmazát, amelyeket a $|\varphi\rangle$ és $|\psi\rangle$ tenzori szorzatának nevezünk, szokásos erre a $|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle$ jelölés is. Ezeket az elemeket a $\mathfrak{H}_1 \otimes \mathfrak{H}_2$ -vel jelölt tenzori szorzattér *speciális* elemeinek fogjuk tekinteni. Legyen most $|u_i\rangle$ egy ortonormált bázis $\mathfrak{H}_1$ -ben és $|v_j\rangle$ egy ortonormált bázis $\mathfrak{H}_2$ -ben, és legyen $|\varphi\rangle = \sum_i a_i |u_i\rangle$, illetve $|\psi\rangle = \sum_j b_j |v_j\rangle$. A $|\varphi\rangle|\psi\rangle$ szorzatot a $|\varphi\rangle|\psi\rangle = \sum_i a_i |u_i\rangle \sum_j b_j |v_j\rangle$ alakba írva és a szorzásokat tagonként elvégezve a $|\varphi\rangle|\psi\rangle = \sum_{i,j} a_i b_j |u_i\rangle |v_j\rangle$ eredményt kapjuk. Ennek alapján tekinthetjük az $|u_i\rangle |v_j\rangle$ alakú, (vagy $|u_i\rangle \otimes |v_j\rangle$ alakú) rendezett párokat a tenzori szorzattér bázisvektorainak, amely bázisban a $|\varphi\rangle|\psi\rangle$ elem kifejtési együtthatói az $a_i b_j$ alakú szorzatok.

Egy lineáris tér esetén azonban, a bázisvektorok tetszőleges lineáris kombinációjának a tér elemének kell lennie, tehát az $|u_i\rangle |v_j\rangle$ összes lehetséges tetszőleges c_{ij} (komplex) számokkal képezett

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |u_i\rangle |v_j\rangle \quad (41.1)$$

lineáris kombinációját, vagy a bonyolultabb írásmóddal a $|\Psi\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |u_i\rangle \otimes |v_j\rangle$ elemeket is meg kell engednünk ahhoz, hogy az így kapott vektorok valóban lineáris vektorteret adjanak. Ezért a következőkben ezen lineáris kombinációk összességét tekintjük a tenzori szorzattér elemeinek definiációjaként.

Világos azonban, hogy egy ilyen $|\Psi\rangle$ általában nem írható $|\varphi\rangle|\psi\rangle$ alakba, mert ehhez az kellene, hogy tetszőleges c_{ij} számokhoz találjunk egy olyan a_i és b_j számsorozatot, hogy a $c_{ij} = a_i b_j$ minden i -re és j -re teljesüljön, ami általában nem lehetséges.

Ha mind $\mathfrak{H}_1$ mind $\mathfrak{H}_2$ véges dimenziós és a dimenziószámok n_1 illetve n_2 , akkor a $\mathfrak{H}_1 \otimes \mathfrak{H}_2$ tenzori szorzattér nyilvánvalóan $n_1 \cdot n_2$ dimenziós. A $c_{ij} = a_i b_j$ alakú fölbontás lehetetlensége tetszőleges c_{ij} esetén ebből már közvetlenül is látszik, hiszen $n_1 \cdot n_2$ számú föltételt $n_1 + n_2$ adattal kellene kielégíteni.

41.1 Feladat: Legyen $\mathfrak{H}_1$ és $\mathfrak{H}_2$ is kétdimenziós és legyen ezekben $|u_i\rangle$, illetve $|v_j\rangle$ bázis. Tekintsük a

tenzori szorzattér következő elemét $|\Psi\rangle = c_{11} |u_1\rangle |v_1\rangle + c_{22} |u_2\rangle |v_2\rangle$.

Mutassuk meg, hogy ha pontosan ez a két együttható – c_{11} és c_{22} – nem nulla, akkor nincs olyan $|\varphi\rangle$ és $|\psi\rangle$, aminek ez az elem a tenzori szorzata lenne.

A tenzori szorzattér tehát tartalmazza az egyes terek vektorainak tenzori szorzatát, de annál bővebb, vannak olyan elemei amelyek nem írhatók szorzat alakba.

A $\mathfrak{H}_1 \otimes \mathfrak{H}_2$ -beli belső szorzatot a

$$\left(\sum_{i,j} c_{ij} |u_i\rangle |v_j\rangle, \sum_{k,l} d_{kl} |u_k\rangle |v_l\rangle \right) = \sum_{i,j,k,l} c_{ij}^* d_{kl} \langle u_i | u_k \rangle \langle v_j | v_l \rangle = \sum_{i,j} c_{ij}^* d_{ij} \quad (41.2)$$

előírásnak megfelelően számítjuk ki.

Meg lehet mutatni, hogy a tenzori szorzattér elemeire adott (41.1) definíció, illetve a belső szorzat értéke független a $\mathfrak{H}_1$ -beli és $\mathfrak{H}_2$ -beli bázisválasztástól. Ez utóbbi tény arra utal, hogy lehetséges a tenzori szorzattérnek egy eleve bázisoktól független, jóval elegánsabb, de emiatt több absztrakciót igénylő definíciója. Erre vonatkozóan a matematikai irodalomra utalunk.

A kvantummechanikában a tenzori szorzattér elemei között föllépő különbözőség jelentős fizikai különbséget jelent. A $|\varphi\rangle |\psi\rangle$ alakú elemeket szorzatállapotoknak nevezzük, azokat pedig amelyek nem írhatók szorzat alakba, *összefonódott állapotoknak*.

A tenzori szorzattér általános fogalma viszonylag egyszerűen megérthető abból a konkrét példából, amikor a két szóban forgó tér a $\varphi(x_1)$ és $\psi(x_2)$ négyzetesen integrálható függvények tere, amelyek egy-egy részecske x tengely menti elhelyezkedéséhez tartozó valószínűségi amplitúdók. A szorzatállapotok ekkor a $\varphi(x_1)\psi(x_2)$ függvényszorzatok, míg a teljes tenzori szorzattér elemei az összes – mindkét változójuk szerint négyzetesen integrálható – $\Psi(x_1, x_2)$ kétváltozós függvények. Világos, hogy nem minden ilyen kétváltozós függvény írható $\varphi(x_1)\psi(x_2)$ alakba, de kifejthető az egyes terekben értelmezett $u_i(x_1)$ és $v_j(x_2)$ külön-külön ortonormált bázisfüggvények rendszere szerint.

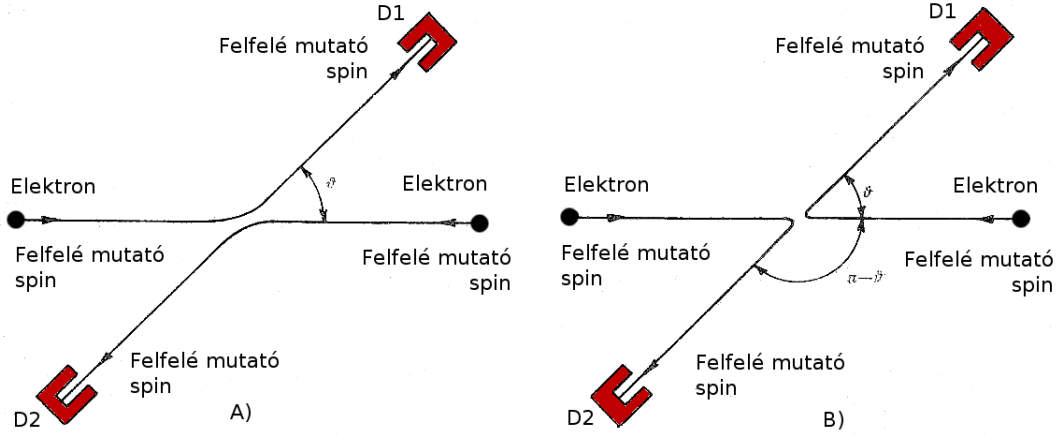
A fönti konstrukció illetve definíció nyilvánvaló módon kiterjeszthető arra az esetre, ha nem két hanem több részecskénk van. Ilyenkor az együttes állapotok $\sum_{i,j,\dots,l} c_{ij\dots l} |u_i\rangle |v_j\rangle \dots |w_l\rangle$ alakúak, azaz az egyes részecskék terében választott ortonormált bázisok szorzatainak lineárkombinációi adják a lehetséges állapotokat.

Mindez azonban csak abban az esetben érvényes, ha a szóban forgó részecskék különbözőek, ami azt jelenti, hogy valamely belső tulajdonságuk szempontjából különböznek. Például egy elektron és egy pozitron különbözik a töltésében, egy elektron és egy müon különböző tömegű stb. Ezek az ún. *megkülönböztethető* részecskék. *Megkülönböztethető részecskék együttes állapottere a megfelelő egyrészecske terek tenzori szorzata.*

A kvantummechanikában azonban vannak *megkülönböztethetelen* részecskék is. Jelenlegi ismeretink szerint pl. két elektron, vagy két foton semmilyen módon nem különböztethető meg. Megjegyezzük, hogy ez a tulajdonság nem azonnal nyilvánvaló egy-egy új részecske fölfedezésénél. Eleinte úgy gondolták, hogy a több különböző folyamatban is keletkező neutrínók is azonosak. Később kiderült, hogy ez nem így van, a neutrínó különbözik az antineutrínótól, illetve léteznek úgynevezett μ -neutrínók és elektron-neutrínók. A proton, a neutron és más erős kölcsönhatásban részt vevő részecskék belső szerkezetét u (up) és d (down) és további kvarkok mint összetevők segítségével lehet megmagyarázni. A továbbiakban világossá vált, hogy az u kvarkok sem mind azonosak, hanem a színtöltésnek nevezett tulajdonságban különböznek egymástól. Az alábbiakban tehát a minden tekintetben azonos részecskékre vonatkozó megfontolásokat tesszünk.

A megkülönböztethetelenség miatt egy érdekes probléma merül föl. Ennek megvilágítására tekintsünk példaként két azonos részecskét és egy olyan kísérletet ahol ezek a laboratóriumban szóródnak egymáson. Legyen a két részecske állapota kezdetben $|1 : p_z; 2 : -p_z\rangle$, ahol $|p_z\rangle$ egy $\hat{\mathbf{z}}$ irányba haladó de Broglie-hullám. Egy pontosabb leírásnál lehet ez egy normálható hullámcsomag

állapot is, amelyben $\langle P \rangle = p_z$. Tegyük föl, hogy a szóródás után az egyes részecskéket a tömegközéppontból nézve az $\hat{n}$ illetve a $-\hat{n}$ egységvektorokkal jelzett irányban detektáljuk.



73. ábra. Azonos részecskék szóródása egymáson

A folyamat kétféleképpen is végbemehet. Az egyik lehetőség szerint az 1. részecske szóródik az $\hat{n}$ irányba és a 2. a $-\hat{n}$ irányba. A másik szerint pedig az 1. részecske szóródik a $-\hat{n}$ irányba és a 2. az $\hat{n}$ irányba. Így a következő kétfajta átmenet lehetséges:

$$|1 : p_z; 2 : -p_z\rangle \longrightarrow |1 : p_n; 2 : -p_n\rangle, \quad (41.3)$$

vagy

$$|1 : p_z; 2 : -p_z\rangle \longrightarrow |1 : -p_n; 2 : p_n\rangle. \quad (41.4)$$

Ez a két végállapot általános értelemben még ortogonális is egymásra. Ha a részecskék megkülönböztethetők, akkor meg lehet mondani, hogy melyik a végállapot. Ha viszont a részecskék megkülönböztethetetlenek, akkor nem tudjuk megmondani, hogy melyik következett be, mert az eddigiek alapján a kettő közül akármelyik is lehet, sőt az is lehet, hogy az igazi végállapot a kettő lineáris kombinációja:

$$|\Psi_f(1, 2)\rangle = c_1 |1 : p_n; 2 : -p_n\rangle + c_2 |1 : -p_n; 2 : p_n\rangle. \quad (41.5)$$

Itt tehát egy fizikai eredményhez (nevezetesen, hogy egy részecske érkezik az $\mathbf{n}$ irányban elhelyezett detektorba és egy a $-\mathbf{n}$ irányban található) végtelen sok különböző állapotvektor is rendelhető. Ezt egyfajta degenerációnak szokás tekinteni, és ezt nevezzük *kicserélődési degenerációnak*. Ez azonban fizikai szempontból nem kielégítő. Egyszerűen meg lehet ugyanis mutatni, hogy a fenti, meghatározott fizikai szituációhoz tartozó állapoton végrehajtott kvantumos mérési eredmény valószínűsége függ az együtthatók választásától. Más szóval, egy meghatározott fizikai szituációban a mérési eredmény valószínűsége nincs egyértelműen meghatározva.

Arra a következtetésre jutunk tehát, hogy a (41.5) képlettel leírt példában az együtthatóknak egyértelműen meghatározottnak kell lenniük. Ezek megválasztására nézve pedig a természet válasza a következő. Az egyértelmű és helyes eredményt bizonyos részecskéknél akkor kapjuk, ha a $|\Psi(1, 2)\rangle$ állapot szimmetrikus a részecskék fölcserélésével szemben, míg a részecskék egy másik osztálya esetén a helyes állapot antiszimmetrikus. Szimmetrikusnak nevezünk egy kétrészecske állapotot, ha a részecskék cseréje esetén az állapotvektor önmagába megy át, antiszimmetrikusnak akkor, ha az állapotvektor előjelet vált. Előrebocsátjuk az eredményt amelyet alább részletesen is elemezni fogunk, majd posztulátumként is ki fogunk mondani. Tapasztalati tény a következő. Ha a megkülönböztethetetlen részecskék spinje egész, akkor az állapotuk szimmetrikus, ha a spinjük feles, akkor antiszimmetrikus. A fenti példában így egész spinű részecskék esetén a $c_1 = c_2$, feles spinűeknél a $c_1 = -c_2$ a helyes választás. Ha az egyes részecskékre vonatkozó állapotok normáltak, s ezt megköveteljük a $|\Psi_f(1, 2)\rangle$ -től is, akkor továbbá $|c_1| = |c_2| = 1/\sqrt{2}$.

Általánosabban is meg fogjuk fogalmazni ezt. Tekintsünk egy állapotot $\mathfrak{H} \otimes \mathfrak{H}$ -ban, ahol most a két Hilbert-tér azonos, mivel a részecskék is azonosak. A fentiek szerint ennek egy általános eleme $\sum_{ij} c_{ij} |u_i u_j\rangle$. Vezessük be a P_{21} fölcserélő operátort, amelynek hatása az, hogy a két részecskét megcseréli, azaz egy konkrét szorzatbázisban történő kifejtés esetén a két bázisvektort átcseréli. Egy tetszőleges állapotról tehát, amelynek alakja egy alkalmas bázisban

$$\sum_{ij} c_{ij} |u_i u_j\rangle \longrightarrow P_{21} \sum_{ij} c_{ij} |u_i u_j\rangle = \sum_{ij} c_{ij} |u_j u_i\rangle. \quad (41.6)$$

Az így definiált P_{21} operátort kétszer alkalmazva nyilván visszakapjuk az eredeti állapotot, ezért $P_{21}^2 = 1$. A P_{21} emellett önadjungált operátor is, mivel az $|u_i u_j\rangle$ bázison a mátrixelemeinek alakja

$$(|u_{i'} u_{j'}\rangle, P_{21} |u_i u_j\rangle) = (|u_{i'} u_{j'}\rangle, |u_j u_i\rangle) = \delta_{i'j} \delta_{j'i}, \quad (41.7)$$

ami megegyezik a $P_{21}^\dagger$

$$(|u_{i'} u_{j'}\rangle, P_{21}^\dagger |u_i u_j\rangle) = (P_{21} |u_{i'} u_{j'}\rangle, |u_i u_j\rangle) = (|u_j u_{i'}\rangle, |u_i u_j\rangle) = \delta_{j'i} \delta_{i'j} \quad (41.8)$$

mátrixelemeivel, s így az önadjungáltság föltétele – a linearitás miatt – ezen báziselemek minden lineáris kombinációjára, azaz tetszőleges vektorra fönnáll. Így

$$P_{21}^\dagger = P_{21}. \quad (41.9)$$

A fönti két tulajdonságból következik, hogy

$$P_{21}^\dagger P_{21} = P_{21} P_{21}^\dagger = 1, \quad (41.10)$$

vagyis P_{21} unitér is.

Vizsgáljuk P_{21} sajátvektorait. Ezekre $P_{21}\Phi = \lambda\Phi$. Mivel $P_{21}^2\Phi = \Phi = \lambda^2\Phi$, láthatólag $\lambda = \pm 1$. Azok a sajátvektorok, amelyekre $\lambda = 1$ a szimmetrikus vektorok, azok pedig amelyekre $\lambda = -1$ az antiszimmetrikusak. Vezessük be az

$$S = \frac{1}{2}(1 + P_{21}) \quad \text{és az} \quad A = \frac{1}{2}(1 - P_{21}) \quad (41.11)$$

szimmetrizáló és antiszimmetrizáló operátorokat. Érvényesek a következő állítások: S és A önadjungált és idempotens operátorok, tehát projekciók. Egymásra ortogonális alterekre vetítetnek, mert

$$SA = AS = 0. \quad (41.12)$$

Továbbá

$$P_{21}S = P_{21}\frac{1}{2}(1 + P_{21}) = S, \quad (41.13)$$

illetve

$$P_{21}A = P_{21}\frac{1}{2}(1 - P_{21}) = -A. \quad (41.14)$$

Ezek a $\mathfrak{H} \otimes \mathfrak{H}$ szimmetrikus, illetve antiszimmetrikus alterei.

Vegyünk most egy tetszőleges vektort, alkalmazzuk rá S -et, akkor ez P_{21} szimmetrikus sajátvektora, illetve A -t amely P_{21} antiszimmetrikus sajátvektora. Valóban

$$P_{21}S\Psi = S\Psi, \quad P_{21}A\Psi = -A\Psi. \quad (41.15)$$

Továbbá a két tér direkt összege kiadja a teljes teret, mert

$$S + A = 1, \quad (41.16)$$

ami másképpen azt jelenti, hogy tetszőleges kétrészecske állapot egyértelműen fölbontható egy szimmetrikus és egy antiszimmetrikus állapot összegére:

$$\Psi = \frac{1}{2}(1 + P_{21})\Psi + \frac{1}{2}(1 - P_{21})\Psi = \Psi_s + \Psi_a, \quad (41.17)$$

ahol Ψ_s és Ψ_a ortogonálisak egymásra.

Bonyolultabb a helyzet akkor, ha a részecskék N száma több mint 2. Ennek az esetnek a tárgyalásához fölidézzük a permutációk fogalmát. N db különböző objektum – az alábbiakban az első N természetes szám – különböző lehetséges sorrendekbe való rendezését nevezzük permutációknak. Egy permutáció a következő

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & N \\ k_1 & k_2 & \dots & k_N \end{pmatrix}, \quad (41.18)$$

vagy csak egyszerűen

$$(k_1 k_2 \dots k_N), \quad (41.19)$$

ahol $(k_1 k_2 \dots k_N)$ az első N szám egy más sorrendben való fölírását jelenti. A lehetséges permutációk száma $N!$ és az egyes permutációkat α betűvel is fogjuk jelölni, ahol α valamilyen $(k_1 k_2 \dots k_N)$ permutációt jelent. Ismeretes, hogy értelmezhetjük a permutációk kompozícióját vagy szorzatát és, hogy a permutációk algebrai értelemben csoportot alkotnak, amelyet szimmetrikus csoportnak nevezünk. Minden permutáció megadható mint párok fölcserélésének, más néven transzpozíciójának egymásutánja, azaz szorzata. Egy permutáció többféleképpen is előállítható transzpozíciók szorzataként, de egy adott N esetén minden permutáció két osztályba sorolható, a páros és a páratlan permutációk közé, azaz beszélhetünk a permutáció paritásáról. A páros permutációk azok, amelyeket az eredeti $(1, 2, 3, \dots, N)$ sorozatból a számok páros számú fölcserélésével érhetünk el, míg páratlanok azok, amelyeknél ezen fölcserélések száma páratlan. Noha a fölcserélések száma, mint említettük többféle is lehet, ezen számok paritása, azaz páros vagy páratlan volta egyértelműen meghatározott egy adott permutáció esetén. A páros és páratlan permutációk száma minden adott N esetén ugyanannyi: $N!/2$.

Ilyen módon minden α permutációhoz hozzárendelhetünk egy $\varepsilon_\alpha = (-1)^c$ számot, ahol c az $(1, 2, 3, \dots, N)$ sorrendből az adott α permutáció eléréséhez szükséges cserék száma. $\varepsilon_\alpha = +1$, ha a permutáció páros és $\varepsilon_\alpha = -1$ ha páratlan. Rendeljünk hozzá ezek után minden α permutációhoz egy P_α operátort a következőképpen

$$\alpha = (k_1 k_2 \dots k_N) \longrightarrow P_{(k_1 k_2 \dots k_N)} = P_\alpha, \quad (41.20)$$

$$P_{(k_1 k_2 \dots k_N)} \sum c_{i_1 i_2 \dots i_N} |u_{i_1} u_{i_2} \dots u_{i_N}\rangle = \sum c_{i_1 i_2 \dots i_N} |u_{i_{k_1}} u_{i_{k_2}} \dots u_{i_{k_N}}\rangle. \quad (41.21)$$

Megmutatható, hogy a P_α operátorok unitérek, de nem önadjungáltak. Ez utóbbi onnan látható, hogy két permutáció (pl. két transzpozíció) szorzata nem ugyanaz fordított sorrendben. A transzpozíciók önadjungáltak, szorzatuk viszont csak akkor, ha fölcserélhetők, s ez utóbbi általában nem áll fönn.

Vezessük be az

$$S = \frac{1}{N!} \sum_\alpha P_\alpha \quad (41.22)$$

és az

$$A = \frac{1}{N!} \sum_\alpha \varepsilon_\alpha P_\alpha \quad (41.23)$$

operátorokat. Ezekről viszont megmutatható, hogy önadjungáltak: $S^\dagger = S$, $A^\dagger = A$ és idempotensek, $S^2 = S$, $A^2 = A$, tehát projekciók. S és A egymásra most is ortogonális, azaz $SA = AS = 0$, de összegük – az $N = 2$ eset kivételével – nem adja ki az egységet. Az S operátor sajátvektorai alkotják a tenzorszorzat tér teljesen szimmetrikus alterét, az A operátoré az antiszimmetrikus alteret.

Vannak azonban olyan – ezekre ortogonális – alterek, amelyek sem nem szimmetrikusak sem nem antiszimmetrikusak, kivéve ha csak két részecskéről van szó.

A permutációcsoport tulajdonságai alapján be lehet látni, hogy tetszőleges α_0 permutáció esetén

$$P_{\alpha_0}S = S, \quad P_{\alpha_0}A = \varepsilon_{\alpha_0}A. \quad (41.24)$$

Ez utóbbi egyenlőségek közül az első szerint bármilyen Ψ állapotra $P_{\alpha_0}S\Psi = S\Psi$. Vagyis az S sajátalterében lévő állapotban a részecskék tetszőleges cseréje esetén a vektor nem változik, ezért is nevezzük ezt az alteret szimmetrikusnak. A második egyenlőség szerint pedig, az antiszimmetrikus alter egy állapotán végrehajtott permutáció nyomán az állapot nem változik, ha a permutáció páros, de előjelet vált, ha a permutáció páratlan, így speciálisan minden csere is előjelváltáshoz vezet.

A több részecskerendszerben értelmezett lineáris operátorok általános alakja $B(1, 2, \dots, N)$, ahol a számok egyszerűen azt jelentik, hogy az operátor valamilyen módon hat az első, a második stb. részecske koordinátáira (a koordináta szót itt most megfelelő általános értelemben értjük). Speciális esetként tekintsük a Hamilton-operátort. Ha a részecskék azonosak, akkor a H operátor nem változhat, ha bármely két részecskét egymással fölcserélünk, s így akkor sem, ha azok bármely permutációját vesszük. Emiatt

$$\begin{aligned} P_\alpha H(1, 2, \dots, N) \Psi(1, 2, \dots, N) &= H(\alpha(1, 2, \dots, N)) \Psi(\alpha(1, 2, \dots, N)) = \\ &= H(1, 2, \dots, N) P_\alpha \Psi(1, 2, \dots, N). \end{aligned} \quad (41.25)$$

A fenti egyenlőségből látható, hogy a $H(1, 2, \dots, N)$ operátor fölcserélhető a P_α permutációs operátorokkal. Ezért a H -t és minden ilyen tulajdonsággal bíró operátort szimmetrikusnak nevezünk.

Most már kimondhatjuk a posztulátumot, amely földolja a korábban látott kicserélődési degenerációt:

7. Posztulátum:

*Több azonos részecskéből álló kvantumrendszer állapottere a $\mathfrak{H} = \mathfrak{H} \otimes \mathfrak{H} \otimes \dots \otimes \mathfrak{H}$ tenzori szokat Hilbert-térnek a részecskék fajtájától függően vagy a teljesen szimmetrikus, vagy a teljesen antiszimmetrikus altere. Azokat a részecskéket, amelyek állapottere a szimmetrikus alter bozonoknak (*S. Bose indiai fizikus nevéből*), amelyeké az antiszimmetrikus alter, azokat fermionoknak (*E. Fermi nevéből*) nevezzük. A tapasztalat szerint ha a kérdéses részecskék sajátimpulzusmomentumát, spinjét egész j ($0, 1, 2, \dots$) kvantumszám adja meg, akkor a részecskék bozonok, ha pedig félegész j ($1/2, 3/2, \dots$) kvantumszám, akkor fermionok.*

Ezt a posztulátumot a tapasztalat alapján lehet megállapítani. Alább látni fogjuk, hogy milyen fizikai tények szólnak az érvényessége mellett. A kvantummechanikán túlmutató kvantumtérelmélet keretén belül ez – az úgynevezett spin és statisztika kapcsolatáról szóló tétel – további megalapozást is kap.

42. Független részecskék

Sokszor előfordul, hogy egy sokrészecskerendszert úgy kezelünk, mintha az egyes részecskék között nem lenne kölcsönhatás. Ez egzakt például üregbeli elektromágneses mezőt reprezentáló fotonok esetén, amelyek között nincs kölcsönhatás. Sok esetben azonban közelítőleg igaznak tekinthető pl. elektronok vagy más részecskék esetében is, ha azok térfogati sűrűsége nem túlságosan nagy. Ekkor – az előző szakaszban tárgyaltak szerint – a több részecskerendszerbeli állapotok egyrészecskeállapotok, azaz az egyes Hilbert-térbeli elemek tenzorszorzatainak speciális lineáris kombinációiként írhatók föl, mert van értelme külön-külön egyrészecske állapotokról is beszélni.

Vizsgáljuk először két részecske esetét. Tegyük föl, hogy tudjuk, hogy két részecske esetén az egyik a $|\varphi\rangle$ a másik a $|\chi\rangle$ állapotban van, akkor a szimmetrizálási posztulátumnak megfelelő fizikai állapot bozonok esetén

$$|\Psi\rangle = \mathcal{N}(|\varphi\rangle|\chi\rangle + |\varphi\rangle|\chi\rangle), \quad (42.1)$$

fermionok estén

$$|\Psi\rangle = \mathcal{N}(|\varphi\rangle|\chi\rangle - |\varphi\rangle|\chi\rangle), \quad (42.2)$$

ahol $\mathcal{N}$ a normálási tényező. Ha $|\varphi\rangle$ és $|\chi\rangle$ ortogonális $\mathcal{N}$ éppen $1/\sqrt{2}$. Abban a speciális esetben, amikor $|\varphi\rangle = |\chi\rangle$, a bozonokra a $|\varphi\rangle|\varphi\rangle$ az eredmény, amely nyilvánvalóan szimmetrikus, fermionokra viszont 0, azaz két fermion nem lehet ugyanabban az egyrészecske állapotban. Ezt nevezzük Pauli-elvnek.

N független részecske esetén, ha az egyrészecske állapotok $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_N\rangle$, akkor fermionok esetén a megfelelő teljesen antiszimmetrikus állapot egy determináns:

$$|\Psi\rangle = \mathcal{N} \begin{vmatrix} |1:\varphi_1\rangle & |2:\varphi_1\rangle & \dots & |N:\varphi_1\rangle \\ |1:\varphi_2\rangle & |2:\varphi_2\rangle & \dots & |N:\varphi_2\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |1:\varphi_N\rangle & |2:\varphi_N\rangle & \dots & |N:\varphi_N\rangle \end{vmatrix}, \quad (42.3)$$

amelyet Slater-determinánsnak nevezünk. Itt egy elem $|k:\varphi_j\rangle \equiv |\varphi_j(k)\rangle$ azt jelenti, hogy a k -adik részecske a $|\varphi_j\rangle$ egyrészecske állapotban van. Ha a determinánsban bármely két egyrészecske állapot megegyezik, akkor a determináns megfelelő sorai is megegyeznek, amiből következik, hogy a determináns 0, s így ilyen állapot nem lehetséges. Így ismét a Pauli-elvet kaptuk, amely tehát a fermionokra vonatkozó antiszimmetrizálási posztulátum speciális esete.

Tekintsük most az N db független, tehát nem kölcsönható részecske $H(1, 2, \dots, N)$ Hamilton-operátorát. Mivel nincs kölcsönhatás, a H szükségképpen az egyes részecskék Hamilton-operátorának összege:

$$H(1, 2, \dots, N) = \sum_{i=1}^N h(i), \quad (42.4)$$

ahol minden $h(i) = h$ azonos alakú, mert a részecskék azonosak. Oldjuk meg h sajátértékproblémáját:

$$h|\varphi_k\rangle = \varepsilon_k|\varphi_k\rangle. \quad (42.5)$$

Ekkor a teljes H

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (42.6)$$

sajátértékproblémájának megoldásai lesznek a

$$|\Psi\rangle = |\varphi_{k_1}(1)\rangle|\varphi_{k_2}(2)\rangle\dots|\varphi_{k_N}(N)\rangle \quad (42.7)$$

alakú vektorok a tenzori szorzattérben, ahol a $|\varphi_{k_j}(1)\rangle \equiv |1:\varphi_{k_j}\rangle$ állapot valamilyen megoldása a fönti (42.5) úgynevezett egyrészecske-egyenletnek, és a H megfelelő energiasajátértékei $E = \varepsilon_{k_1} + \varepsilon_{k_2} + \dots + \varepsilon_{k_N}$. A (42.7) tenzori szorzatként írt, matematikailag helyes megoldás azonban általában nem teljesíti a szimmetria vagy antiszimmetria követelményét. Azaz ahhoz a követelményhez, hogy (42.7) egy fizikai állapotnak megfelelő valódi sajátvektor, vagy az S operátor (bozonok), vagy az A operátor (fermionok) sajátvektorának is kell lennie. Ezért egy tetszőleges sajátvektort szimmetrizálni, vagy antiszimmetrizálni kell. Az előzőek szerint ehhez a fönti $|\Psi\rangle$ -re alkalmazzuk az S , illetve az A operátort, s mivel H és minden P_α fölcserélhetők ld. 41. szakasz, világos, hogy bármely P_α permutációs operátort alkalmazva a $|\Psi\rangle$ vektorra az eredmény ismét ugyanezen E sajátértékhez tartozik, s ugyanez igaz a permutációk S vagy A típusú lineáris kombinációira is. Az így kapott $S|\Psi\rangle$, illetve $A|\Psi\rangle$ vektorok tehát azon kívül, hogy H sajátvektorai teljesítik a megfelelő szimmetrizálási posztulátumot is.

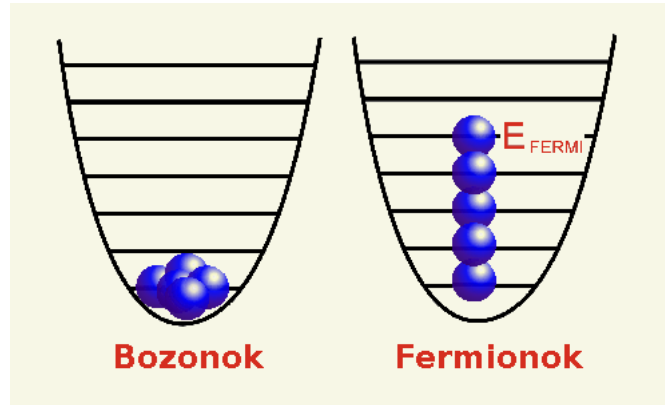
42.1. Azonos független részecskék alapállapotai

Alapállapotnak a kvantumrendszer legalacsonyabb energiájú állapotát nevezzük. (A környezetével termikus egyensúlyban lévő rendszer elegendően mély hőmérsékleten ebben az állapotban található.) Az előző alponban mondottak szerint, a bozonok esetében a független részecskékből álló

sokrészecskerendszer legalacsonyabb együttes energiája nyilvánvalóan egy olyan állapothoz tartozik, amelyben minden egyes részecske a legalacsonyabb – itt ε_0 -al jelölt – energiájú $|\varphi_0\rangle$ egyrészecske állapotban van. Azaz a teljes Ψ állapot

$$\Psi = |\varphi_0(1), \varphi_0(2), \dots \varphi_0(N)\rangle, \quad (42.8)$$

amely természetesen szimmetrikus, és a hozzá tartozó teljes energia $E = N\varepsilon_0$. Tömeggel rendelkező részecskék közül az alkáli atomok (Na, Rb) ritka gázában sikerült 1995-ben lényegében ilyen állapotot nagyon mély hőmérsékleten létrehozni, ezt nevezzük Bose-Einstein kondenzációnak. A kondenzáció csak olyan esetben történik, meg ha a gázt alkotó részecskék egész spinűek. Ez a gáz ilyenkor egy úgynevezett BEC (Bose-Einstein condensate), amelynek létezését először Einstein jósolta meg 1925-ben. (Bose nevéhez valójában a Planck-törvénynek egy olyan levezetése fűződik, amelyben a fotonok – mint megkülönböztethetetlen részecskék – ideális gázára vonatkozó statisztikus fizikai megfontolást használt. Einsteint ez vezette arra a kérdéskörre, hogy mi történik hasonló esetben tömeggel rendelkező részecskékkel). Érdekes módon feles spinű atomok gázában is sikerült hasonló állapotot létrehozni, de ekkor, még a kondenzáció előtt, az atomok párokba rendeződnek, s mivel egy pár együtt már egész spinű, a kondenzáció lehetővé válik.



74. ábra. Azonos független részecskékből álló kvantumrendszer alapállapotban. A bozonok esetén minden részecske a legalacsonyabb energiájú egyrészecske állapotban található. Fermionok esetében az antiszimmetriából következő kizárási elv szerint egy-egy egyrészecske állapotban csak egyetlen részecske lehet.

A fermionok esetében a legalacsonyabb energiájú állapot egy olyan föntebb látott (42.3) Slater-determináns lesz, amelyben a $|\varphi_{k_j}\rangle$ állapotok mind különbözőek (egyébként a determináns eltűnne), de a hozzájuk tartozó egyrészecske energiák nem szükségképpen különbözőek, mert az ε_k egyrészecske energiák elfajultak is lehetnek, s így különböző ortogonális állapotokban azonos energiával lehetnek a részecskék. Legyenek az egyrészecske-probléma ε_k sajátértékei növekedésük sorrendjében indexelve, azaz

$$\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_2 \dots, \quad (42.9)$$

és legyenek a megfelelő elfajultsági indexek $g_0, g_1, g_2, \dots$. Ekkor a legalacsonyabb teljes energia úgy valósul meg, hogy a részecskék a lehetséges legalacsonyabb egyrészecske energiaértékkel bíró állapotokat töltik be, de ez legföljebb annyi részecskét jelenthet, ahányszor a kérdéses ε nivå elfajult. Így a teljes rendszer alapállapot (legalacsonyabb) energiája

$$E_0 = g_0\varepsilon_0 + g_1\varepsilon_1 + \dots + g_{n-1}\varepsilon_{n-1} + (N - \sum_{k=0}^{n-1} g_k)\varepsilon_n, \quad (42.10)$$

ahol n az a legkisebb egész szám amelyre $g_0 + g_1 + \dots + g_n \geq N$.

Ha a teljes rendszer alapállapotban van, azaz energiája E_0 , akkor a legmagasabb még betöltött állapothoz tartozó $\varepsilon_n = \varepsilon_F$ energiát Fermi-energiának nevezzük, amely elsősorban a makroszkopikus szilárd testekben pl. fémekben és félvezetőkben mozgó elektronok viselkedésének leírásánál játszik fontos szerepet. Mivel ezekben az anyagokban szobahőmérsékleten $\varepsilon_F \gg kT$, ezért termikus okokból az összes elektron közül csak olyan számú gerjesztődik, ahány az ε_F vagy annál mintegy kT -vel kisebb energiával rendelkezik. Ez a szám egy makroszkopikus szilárd test esetén sok nagyságrenddel kisebb mint N , aminek a termikus tulajdonságok szempontjából érdekes következményei vannak. Erről részletesebben a statisztikus fizikai tanulmányok során lesz szó.

43. Többelelektronos atomok

A korábbiakban már jeleztük, hogy a különböző korrekciók miatt az elsődleges szerkezeten túl már a legegyszerűbb atom, az egy elektront tartalmazó hidrogén spektruma is bonyolult finomszerkezetet mutat. Első közelítésben azonban a spektrum egyszerű, az energia az $\varepsilon_n = (-1/n^2) Ry$ képlet szerint csak az n főkvantumszámtól függ, és ez az energiaérték $2n^2$ -szeresen degenerált.

A többelelektronos atomok esetén szigorúan véve csak a sok elektron együttesének a mag és egymás terében létrejövő stacionárius állapotairól lehetne beszélni. Ezek egy Z rendszámú és így Z elektront tartalmazó atom esetén a

$$\left(\sum_{i=1}^Z \frac{\mathbf{P}_i^2}{2m_e} - \sum_{i=1}^Z \frac{Zq_0^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{R}_i|} + \frac{q_0^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j \neq i} \sum_{i=1}^Z \frac{1}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} \right) \psi(1, 2, \dots, Z) = E\psi(1, 2, \dots, Z) \quad (43.1)$$

energiasajátérték-egyenlet megoldásai, amelyben a magot mozdulatlanak tekintjük. Itt az elektronok közötti – a harmadik tag által leírt – kölcsönhatás ellenére, az atomban megfelelő pontossággal működik a függetlenrészecske-közelítés, azaz használható az egyes elektronok állapotának fogalma. Egy adott elektronra hat a mag vonzása és az összes többi elektron taszítása. A kiválasztott elektronra az utóbbiak hatását egy úgynevezett *effektív potenciállal* vesszük figyelembe. Tehát csak egyetlen elektron sajátértékproblémáját oldjuk meg ebben az effektív potenciáltérben. Ezt nevezzük *egyelektron-közelítésnek*, melynek H_{eff} Hamilton-operátora:

$$H_{\text{eff}} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m_e} + V_{\text{eff}}(\mathbf{R}) \quad (43.2)$$

alakú. Atomok esetében föl lehet tételteni, hogy a V_{eff} effektív potenciál gömbszimmetrikus, azaz a kiválasztott elektron szempontjából a többi elektron töltéssűrűsége is átlagban gömbszimmetrikus a mag körül. Ez a föltételezés meglepően jól működik, ami mutatja ennek a képnek a fizikai jogosságát. A kiválasztott elektron effektív Hamilton-operátorát így a következő alakba írhatjuk:

$$H_{\text{eff}} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m_e} - \frac{q_0^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z(R)}{R}, \quad (43.3)$$

ahol $Z(r)q_0$ az elektron által "érezelt" effektív töltés, ha az elektron a magtól r távolságra van és $Z(r) \rightarrow Z$ ha $r \rightarrow 0$, azaz a mag közelében, és $Z(r) \rightarrow 1$, ha $r \rightarrow \infty$. Az utóbbi esetben a többi $Z-1$ elektron *leárnýékolja* a Zq_0 töltésű mag hatását így az $r \rightarrow \infty$ esetben az elektron egy pontszerű q_0 pozitív elemi töltés potenciáljában mozog. Az operátort természetesen az $r \rightarrow R$ helyettesítéssel kapjuk.

Az egyes elektronok a többi elektron és a mag gömbszimmetrikusnak tekinthető terében mozognak és így a pályák hasonlóan jellemezhetők, mint a hidrogén állapotai. A gömbszimmetria miatt az L^2 és az L_z fölcserélhetők H_{eff} -el, így ezek sajátértékei, azaz az ℓ és az m jó kvantumszámok. Egy stacionárius állapotot első közelítésben így az energiasajátérték (főkvantumszám) mellett, az ℓ és m , továbbá az m_s spinquantumszám-vetület jellemez. Ez utóbbi triviálisan azért, mert a H_{eff} a spintól független, tehát a spinvetület operátorával is fölcserélhető. A H_{eff} sajátállapotait egyelektron

állapotoknak, másnéven pályáknak szokás nevezni, de ez nem jelent semmiféle klasszikus pályát. A megfelelő sajátértékeket egyelektron energiáknak, vagy pályae energiának hívjuk.

A H-atomban a pályae energiák n növelésével nőnek és ℓ -től függetlenek. A többelektronos atomokra a helyzet bonyolultabb, mert az elektron-elektron kölcsönhatás miatt a pályae energiák az ℓ -től is függenek, azaz *megszűnik* az a Coulomb-térben érvényes elfajulás, hogy egy adott n főkvantumszámhoz tartozó de különböző mellékkvantumszámmal ($\ell = 0, 1, 2 \dots n-1$) jelzett állapotok azonos energiájúak. A mellékkvantumszám értékétől függően ezeket az állapotokat a H-atomhoz hasonlóan az alábbi megfeleltetés szerinti

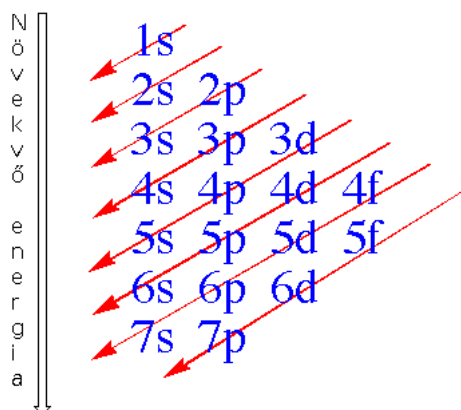
$$\begin{array}{cccccc} \ell = & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & \dots \\ & s & p & d & f & g & \dots \end{array} \quad (43.4)$$

betűkkel szokás jelölni. Ezek szerint van szó $1s, 2s, 2p, 3s$, stb. pályákról, ezek energiája tehát egy többelektronos atomnál már függ az ℓ értékétől is. Ezért a pályákat az n főkvantumszámmal és a pályaimpulzusnyomatékukra jellemző ℓ mellékkvantumszámmal szoktuk megadni. A gömbszimmetria miatt viszont az adott n, ℓ -hez tartozó energiaérték még a pályaimpulzusmomentum értékének valamely tengely (általában a z tengely) irányára tekintett vetülete (mágneses kvantumszám értéke) szerint $(2\ell + 1)$ -szer, az elektron saját feles spinje miatt pedig még kétszeresen, tehát együttesen $2(2\ell + 1)$ -szeresen degenerált. (Relativisztikus okokból a H-atomhoz hasonlóan valójában ezek között is van csekély energiakülönbség, ez a finomszerkezet).

A számítások eredményei szerint a tapasztalattal egyezően adott ℓ esetén a nagyobb n -hez nagyobb energia és adott n esetén szintén nagyobb ℓ -hez nagyobb energia tartozik. Egy adott n -hez tartozó állapotokat héjaknak is szokás nevezni. A pályae energiák szerint növekvő sorrend a következő:

$$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p, \quad (43.5)$$

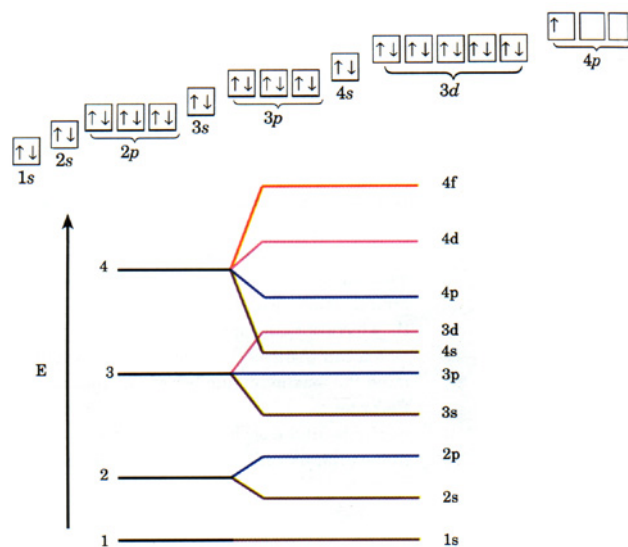
melyet a 75. ábráról lehet leolvasni a nyílak mentén felülről lefelé haladva.



75. ábra. Az egyes atomi pályák sorrendje növekvő energiák szerint

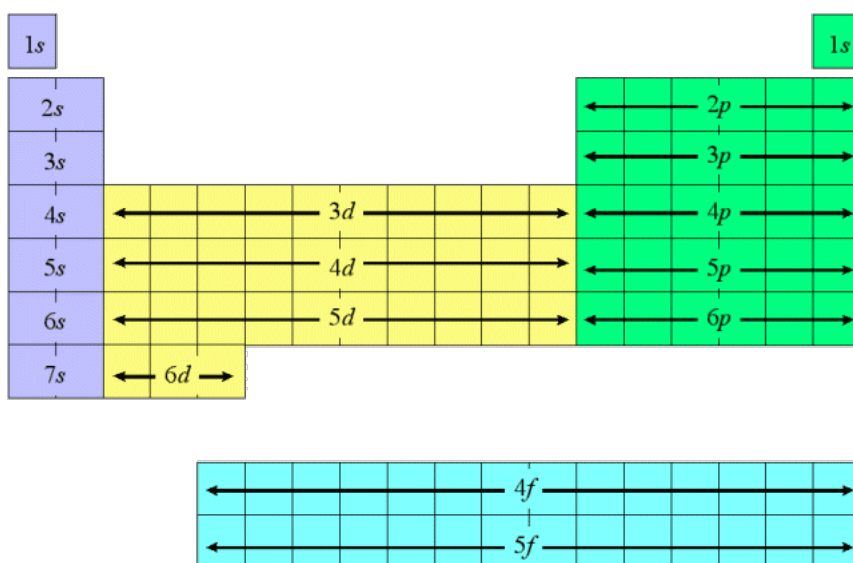
Alapállapotban a Z számú elektron azt a Z db egyrészecske állapotot tölti be, amelyek energiái a fenti ábra szerint követik egymást. Az alapállapot ebben az egyrészecske-közelítésben a megfelelő Slater-determinánssal adható meg. Ezt szokás úgy megfogalmazni, hogy a *Pauli-elvnek* megfelelően a legkisebb energiájú egyelektron állapotokba rendre egy-egy elektront teszünk.

Egy atom elektronkonfigurációján azt értjük, hogy az egyes pályákon, illetve a hozzájuk tartozó energián hány elektron található. Ha egy adott n -el és ℓ -el jellemzett pályán több elektron van, akkor ezeket az ℓ -et jelző betű kitevőjeként írjuk. A H-atom alapállapota $1s$ a He-atomban lévő két elektron alapállapota $1s^2$ konfigurációnak felel meg. A He legelső gerjesztett állapota $1s2s$ konfigurációjú. A periódusos rendszer következő eleme a Li, 3 elektronnal, amelyek közül az alapállapot $1s^22s$ konfigurációnak felel meg, és ez folytatódik a 10-es rendszámú neonig, amelynek konfigurációja $1s^22s^22p^6$, mert a p pályákra legföljebb 6 elektron tehető a Pauli-elv miatt. A fenti 75. ábrából



76. ábra. Az egyes atomi pályák energiája

az is látható, hogy a $3p$ után már nem a $3d$ hanem a $4s$ pálya betöltése következik, ez a kálium és a kalcium külső elektronhéja, amelynek kicsit kisebb az energiája, mint a $3d$ pályáé. A további részleteket illetően atomfizika könyvekre utalunk.



77. ábra. Külső elektronhéjak a periódusos rendszerben

2. TESZTSOROZAT