

Elméleti fizika III.

Kvantummechanika

Hraskó Péter

Pécs, 1998.

Tartalomjegyzék

4.1. A hőmérsékleti spektrum	3
4.2. A fotoeffektus	4
4.3. A radioaktivitás	6
4.4. A vonalas spektrum	6
4.5. Rutherford planetáris atommodellje (1911)	7
4.6. A Bohr-modell (1913)	8
4.7. A Bohr-Sommerfeld modell	10
4.8. A harmonikus oszcillátor kvantálása	10
4.9. A dobozba zárt tömegpont kvantálása	11
4.10. A hidrogénspektrum a Bohr-Sommerfeld modellben	12
4.11. Az impulzuszórány a Bohr-Sommerfeld modellben	13
4.12. A Zeemann-effektus	16
4.13. A Bohr-Sommerfeld modell kritikája	17
4.14. A korrespondencia-elv (Bohr 1918)	18
4.15. A vektortér	19
4.16. Komplex vektortér	21
4.17. A Hilbert-tér	22
4.18. Lineáris operátorok	24
4.19. A hermitikus operátorok	27
4.20. A hermitikus operátorok hatása a vektorokra	29
4.21. Az x -tengely mentén mozgó tömegpont állapotvektora	34
4.22. A fizikai mennyiségek mint operátorok	36
4.23. Az \hat{x} és a \hat{p} operátor \mathcal{H}_x -ben	39
4.24. A szabad tömegpont Hamilton-operátora	45
4.25. A harmonikus oszcillátor Hamilton-operátora	46
4.26. A harmonikus oszcillátor Hamilton-operátorának sajátfüggvényei	49
4.27. A mérési posztulátumok (diszkrét spektrum)	51
4.28. A mérési posztulátumok (folytonos spektrum)	56
4.29. A bizonytalansági reláció	59
4.30. A dinamikai egyenlet	64
4.31. A dinamikai egyenlet általános megoldása	66
4.32. A de Broglie hullámok	68
4.33. A Schrödinger-egyenlet megoldására kirótt feltételek	72
4.34. A potenciállépcső ($E > U$)	73
4.35. A potenciállépcső ($0 < E < U$)	77
4.36. Áthaladás potenciálgáton ($E > U$)	78
4.37. Áthaladás potenciálgáton ($0 < E < U$)	82
4.38. A derékszögű potenciálvölgy	84
4.39. A végtelen potenciálgödör	88
4.40. Általánosítás háromdimenziós mozgásra	93
4.41. Az időtükrözött mozgás	97

4.42. Az optikai interferencia	100
4.43. A de Broglie hullámok interferenciája kristályrácsra	105
4.44. A neutronok	106
4.45. A kristályrács hatása a neutronok terjedésére	107
4.46. A háromfűlű interferométer	111
4.47. A Born hipotézis pontos értelme	115
4.48. Az impulzusmomentum operátora	117
4.49. Az \hat{L}^2 operátor sajátértékei és sajátfüggvényei	119
4.50. Az \hat{L}^2 és az \hat{L}_z közös sajátfüggvényei	121
4.51. A gömbfüggvények transzformációja	127
4.52. A spin	132
4.53. A forgatások és ábrázolásaik	134
4.54. A feles spin ($s = 1/2$)	137
4.55. A Stern-Gerlach kísérlet (1921)	144
4.56. A hidrogénatom	147
4.57. A pontrendszerek kvantummechanikája	150
4.58. Független részecskék	151
4.59. Korrelált részecskék	153
4.60. Spinkorrelációs kísérletek	156
4.61. Fermionok és bozonok	162
4.62. Záró megjegyzések	169

Az első öt fejezetben azokat az alapjelenségeket foglaljuk össze, amelyek ellentmondtak a klasszikus mechanikának és elektrodinamikának, ezért a megmagyarázásuk új elméleti kereteket igényelt.

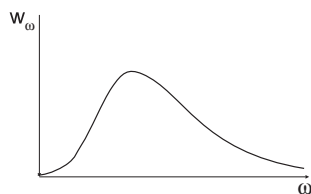
3.1. A hőmérsékleti spektrum

A testek a rájuk eső sugárzást (részben) elnyelik, és a hőmérsékletüktől függő módon elektromágneses sugárzást bocsátanak ki. Ha üres zárt edényt T hőmérsékleten tartunk, az edény belsejében egy idő elteltével a két folyamat egyensúlyba kerül, és az edényben stacionér elektromágneses sugárzási mező alakul ki: ez a *hőmérsékleti sugárzás*.

A hőmérsékleti sugárzás a gázok adott hőmérsékletű egyensúlyi állapotával analóg, ez utóbbiban a molekulák mechanikai energiája, az előbbiben az elektromágneses mező térenergiája a termodinamikai energia. A molekulák sebesség szerinti eloszlásának a hőmérsékleti sugárzás esetében a térenergia-sűrűség frekvenciák szerinti $w_\omega d\omega$ eloszlása felel meg. Ez a frekvenciaeloszlás a *hőmérsékleti spektrum*. A molekulák sebességeloszlásához hasonlóan a hőmérsékleti spektrum sem függhet az edény falának anyagi minőségétől (Kirchhoff-tétel, a statisztikus fizikában fogjuk bizonyítani). A spektrumnak ez az univerzalitása azt sugallta, hogy az elektrodinamika törvényeinek az ismerete elegendő kell, hogy legyen a w_ω függvény meghatározásához, de az ilyen irányú próbálkozások sorra kudarcot vallottak.

A hőmérsékleti spektrum kísérleti vizsgálatát úgy végzik, hogy az edényen apró lyukat fúrnak, az ezen kiáramló sugárzást prizma segítségével a frekvenciák szerint szétbontják, és az egyes frekvenciákhoz tartozó energiát a sugárzás hőhatása alapján megméri. Mivel a lyuk abszolút fekete (minden ráeső sugárzást elnyel), a lyukon keresztül kiáramló sugárzást *fekete sugárzásnak* nevezik. A hőmérsékleti spektrum tehát a fekete sugárzásnak, vagy — másképpen — az abszolút fekete test sugárzásának a frekvenciák szerinti eloszlása.

A spektrum tapasztalati alakja az ábrán látható:



1. ábra.

A spektrum korrekt matematikai alakját Planck először próbálgatás útján találta meg 1900-ban, de néhány héttel később sikerült elméleti úton is levezetnie. Einstein azonban néhány évvel később rámutatott, hogy Planck elméleti levezetése nem volt teljesen korrekt.

Mivel a spektrum a falak anyagi minőségétől független, Planck feltette, hogy a fal harmonikus rezgésre képes elektromos dipólokból áll, amelyek között mindenfajta körfrekvenciájú oszcillátor előfordul. Az egyensúly feltétele az, hogy a dipólok minden ω -n átlagban ugyanannyi energiát abszorbeáljanak, mint amennyit kibocsátanak, miközben a T hőmérsékletnek megfelelő energiaeloszlással rendelkeznek.

A számítások szempontjából kényelmes volt feltenni, hogy az oszcillátorok rezgési energiája nem folytonos, hanem csak véges lépésekben változhat. Konkréten, az ω frekvenciájú oszcillátorokról feltette, hogy energiájukat csak $konst \cdot \omega$ adagokban változtathatják. Planck úgy képzelte, hogy a végképletben ezzel a konstanssal majd nullához tart, és ezzel a lépéssel biztosítja, hogy az oszcillátorok energiája a valószínűségben folytonosan változhasson. Észrevette azonban, hogy a kísérleti eloszlást akkor kapja meg, ha nulla helyett egy bizonyos véges értéket választ. Ez a konstans a *Planck állandó*, amit ma \hbar -al jelölünk, értéke

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} = 1.0545887 \cdot 10^{-34} J \cdot s = 6.582173 \cdot 10^{-22} Mev \cdot s.$$

Planck mindebből arra következtetett, hogy — szöges ellentétben minden addigi ismerettel, — a *harmonikus oszcillátor energiája kvantált*:

$$E_n = \hbar\omega \cdot n \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1)$$

A hőmérsékleti sugárzás Planck-által felfedezett formulája a *Planck-spektrum*:

$$w_\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \quad (2)$$

ahol k a Boltzmann-állandó. Ha ebben a képletben Planck eredeti elgondolása szerint a \hbar konstanssal nullához tartunk, akkor a $w_\omega = \frac{kT}{\pi^2 c^3} \omega^2$ eredményt kapjuk (Rayleigh-Jeans formula). Ez a képlet azonban tapasztalati és elméleti szempontból egyaránt elfogadhatatlan, mert $\omega \rightarrow \infty$ -nél végtelenhez tart és csak alacsony frekvenciákon egyezik a tapasztalattal.

3.2. A fotoeffektus

A jelenség: a fémfelületre eső fény (ultraibolya sugárzás) elektronokat vált ki (fotoelektronok).

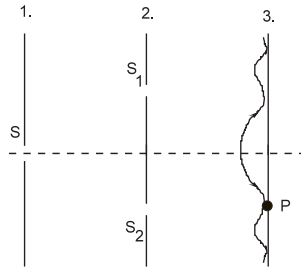
Az elektronokat a fényhullám \vec{E} -je gyorsítja fel annyira, hogy képesek a fémből kilépni. Ezért azt várjuk, hogy amikor a fénynyaláb energiaáramsűrűségét (intenzitását) növeljük — azaz növeljük az elektromos mező átlagértékét a fényhullámban —, a kilépő elektronok energiája növekedjen. A tapasztalat szerint azonban a fényintenzitás növekedésekor nem a fotoelektronok energiája, hanem a száma az, ami növekszik. Az energia növekedését a fény frekvenciájának a megnövelésével érhetjük el.

Einstein fénykvantum hipotézise (1905): Az ω körfrekvenciájú fénynyaláb nulla tömegű részecskékből (fénykvantumokból, későbbi néven fotonokból) áll, amelyeknek $\hbar\omega$ az energiája és $\hbar\vec{k}$ az impulzusa. Egy ilyen feltevést a relativitáselmélet tesz lehetővé (Elektrodinamika jegyzet 54§). A fotoeffektus lényege az, hogy a fénynyaláb egy fotonja ütközik a fém elektronjával, maga megsemmisül és energiáját és impulzusát átadja az elektronnak. A folyamatban az energiamegmaradás tétele a következő egyenlettel fejezhető ki:

$$\hbar\omega = P_1 + P_2 + \frac{1}{2}mv^2,$$

ahol P_1 az ionizációs energia, P_2 a kilépési munka, $K_e = \frac{1}{2}mv^2$ pedig az elektron mozgási energiája a fémből való kilépés után. A képletből következik, hogy $\omega \uparrow \rightarrow K_e \uparrow$. Ha feltesszük még, hogy a fény energiaáramsűrűsége $N \cdot \hbar\omega \cdot c$ -vel egyenlő, ahol N a fotonok sűrűsége, akkor a foton-elektron ütközések és a kilépő fotoelektronok száma a tapasztalatnak megfelelően nő az intenzitással. A hipotézis hihetetlen merészségének az érzékelésére gondoljunk vissza az elektromágneses hullám $\vec{S} = cw \cdot \vec{n}$ energiaáramsűrűség kifejezésére (Elektrodinamika jegyzet, 48.feladat), amelyben $w = \frac{1}{2}\epsilon_0\mathcal{E}^2$ egyáltalában nem függ a körfrekvenciától.

Planck az oszcillátor mint mechanikai rendszer mozgásának a kvantumosságát ismertette fel, Einstein ezt a felismerést kiterjesztette az elektromágneses mezőre is.



2. ábra.

A fotonhipotézist mintegy 20 éven keresztül gyakorlatilag senki sem hitte el. A fény korpuszkuláris és hullámfelfogása között ugyanis a XIX.sz. első évtizedében felfedezett *interferencia* döntött a hullámkép javára, és a fotonhipotézis a kvantumelmélet részletes kidolgozása előtt a newtoni korpuszkuláris felfogás felelevenítésének tűnt. Az interferencia lényege az, hogy a 3.ernyőn (ld. az ábrát) megvilágított és sötét szakaszok váltakoznak. Legyen P valamelyik megvilágítatlan tartomány egy pontja¹. Ha bármelyik rést *letakarjuk*, a P megvilágítottá válik. Ezt a jelenséget semmiképpen

¹Az interferencia jelenségét később külön fejezetben részletesen tárgyaljuk.

sem lehetett megmagyarázni a fény részecske-felfogásának az alapján, és ezalól a fotonhipotézis sem látszott kivételnek.

3.3. A radioaktivitás

Elemek (atomok) részecskekibocsátással új elemmé alakulnak át.

Bármely anyagmennyiség fele az anyagi minőségre jellemző $T_{1/2}$ felezési idő alatt alakul át (Rutherford, 1900).

Annak valószínűsége, hogy egy atom, amely t -ig még nem bomlott el, a $(t, t + dt)$ -ben elbomoljon, $\lambda \cdot dt$ -vel egyenlő. A λ konstans az anyagra jellemző *bomlási állandó* (természetesen semmi köze a hullámhosszhoz, amit ugyanezzel a betűvel jelölünk).

Legyen $N(t)$ azon atomok száma, amelyek t -ig nem bomlottak el. Akkor

$$N(t + dt) = N(t) - \lambda \cdot N(t) \cdot dt$$

$$\frac{dN(t)}{dt} = -\lambda N(t)$$

$$N(t) = N(0) \cdot e^{-\lambda t}.$$

Ez a képlet a radioaktív bomlás törvénye. A $\tau = 1/\lambda$ az *időállandó*, amely azzal az idővel egyenlő, ami alatt a minta e -d részére bomlik.

$$T_{1/2} = \tau \cdot \ln 2.$$

Probléma: Ha egy adott elem atomjai tökéletesen egyformák, miért különböző időpontokban bomlanak el? És ez az időpont hogyan lehet véletlenszerű?

A radioaktív-bomlás három alaptipusa:

1) α -bomlás: a sugárzás (az elektronhoz képest) nehéz, kétszeresen pozitívan töltött u.n. α -részecskékből áll (mint utóbb kiderült, ezek azonosak a hélium atom magjával).

2) β -bomlás: a sugárzás elektronokból áll.

3) γ -sugárzás: az előbbi két bomlástípust kísérő sugárzás, amely igen nagy frekvenciájú fotonokból áll.

3.4. A vonalas spektrum

A ritka gázok csak bizonyos hullámhosszú sugárzást bocsátanak ki és nyelnek el (vonalas spektrum). A látható tartományban a hidrogéngáz spektrumvonalainak a hullámhosszát az

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 3, 4, 5, \dots)$$

empirikusan megállapított *Balmer-formula* (1885) írja le, amelyben az

$$R = 1.09733712 * 10^7 m^{-1}$$

empirikus konstans a *Rydberg-állandó*.

A Balmer-formula által leírt hullámhosszak alkotják a *Balmer-szériát*. További szériák:

$$\text{Lyman-széria} \quad \frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 2, 3, \dots) \quad \text{ultraibolyában}$$

$$\text{Paschen-széria} \quad \frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 4, 5, \dots) \quad \text{infravörösben}$$

$$\text{Brackett-széria} \quad \frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 5, 6, \dots) \quad \text{uo.}$$

$$\text{Pfund-széria} \quad \frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 6, 7, \dots) \quad \text{uo.}$$

A vonalas spektrumok értelmezéséhez atommodellre volt szükség.

3.5. Rutherford planetáris atommodellje (1911)

Az elektron felfedezése után világossá vált, hogy az elektron minden elem atomjának fontos alkotórésze. A felfedező J.J.Thomson kidolgozta az atom „mazsolás pudding” modelljét: pozitív kocsonyás közegben elektronok (a hidrogénatomban a kocsonya közepén egyetlen elektron).

Rutherford 1909-ben α -részecskék szóródását figyelte meg vékony lemezekon, és viszonylag sok visszaszórt α -részecskét talált, ami a Thomson-modell alapján értelmezhetetlen („mint amikor valaki gránáttal selyempapírra lő és a visszapattanó gránáttal önmagát találja el”).

Másfél évi gondolkodás után arra a meggyőződésre jutott, hogy az atomban a pozitív töltés nem nagyméretű „kocsonya” formájában, hanem az atom méreténél jóval kisebb, az elektronnál sokszorosán nagyobb tömegű *atommag* formájában van jelen. Az elektronok úgy keringenek az atommag körül, mint a bolygók a Nap körül. Az α részecskék akkor pattannak vissza, amikor telibe találják egy atommagot. Speciálisan a hidrogénatomban egyetlen elektron kering az azonos nagyságú, ellentétes előjelű töltéssel rendelkező mag körül (ma ezt protonnak nevezzük).

Rutherford annyira komolyan vette ezt a modellt, hogy a modell kedvéért még az elektrodinamikával is hajlandó volt szembe kerülni: Maxwell elektrodinamikája szerint ugyanis a planetáris atommodell nem lehet stabil, mert az elektronok mozgása gyorsuló és ezért sugározna. Láttuk (Elektrodinamika jegyzet, 63.feladat), hogy a hidrogénatom elektronja mintegy 1 ns alatt „bespirálozik” az atommagba.

Áttérünk az u.n. „régí kvantumelmélet” ismertetésére, amely történetileg az első lépcsőfok volt a kvantummechanika felé.

3.6. A Bohr-modell (1913)

Bohr két alapfeltevésből indult ki:

a) A hidrogénatomban a klasszikus körpályák közül csak bizonyosak megengedettek. Ezek a kvantumállapotok, vagy (stacionér) pályák.

b) A sugárzási visszahatás abban jelentkezik, hogy egy E energiájú stacionér pályáról az elektron spontán „átugrik” egy alacsonyabb E' energiájú pályára és közben sugároz. A sugárzás frekvenciáját az

$$E - E' = \hbar\omega \quad (3)$$

képlet határozza meg. A legalacsonyabb energiájú pályáról az elektronnak már nincs hova ugrania, ezért ez a pálya stabil, az elektron tehát nem spirálozik be a centrumba.

Kérdés: hogyan kell kiválasztani a megengedett körpályákat?

Bohr kvantumfeltétele: A megengedett körpályák azok, amelyeken az impulzusnyomaték értéke a \hbar egész számú többszöröse:

$$L = L_n = \hbar \cdot n.$$

Az n neve *kvantumszám*. A kvantumszámok funkciója az, hogy kiválasszák és indexeljék a kvantumállapotokat.

Az n kvantumszámú körpálya E_n energiáját a kvantumfeltételből és a

$$\text{centrifugális erő} = \text{Coulomb-erő}$$

egyenlőségből határozhatjuk meg. Ha r_n , v_n a körpálya sugara és a keringési sebesség az n -ik kvantumállapotban, ezt az egyenlőséget az

$$\frac{mv_n^2}{r_n} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2}$$

képlet fejezi ki. Másrészt, $L_n = r_n \cdot mv_n$, ezért a kvantumfeltétel

$$r_n mv_n = \hbar n$$

alakú. A két egyenletből v_n -t kizárva az

$$\frac{1}{r_n} = \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

kifejezésre jutunk.

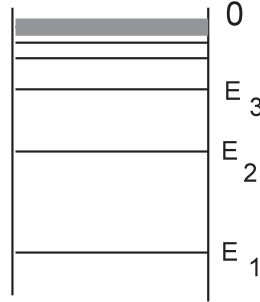
A viriáltételből tudjuk (Mechanika jegyzet 45.feladat), hogy E_n a potenciális energia felével egyenlő:

$$E_n = \frac{1}{2} \cdot \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} \right).$$

Ha ide beírjuk r_n inverzének előbb kapott képletét, megkapjuk a megengedett pályák energiáit (energiaszintek vagy nívók):

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (4)$$

A nívósémát így szokás ábrázolni:



3. ábra.

Látszik, hogy nagyobb n -hez nagyobb energia tartozik. A nívók mind negatív energiájúak, és mivel végtelen sok van belőlük, a nulla értékhez közeledve a nívótávolság nullához tart.

Legyen $n > n'$. Az $n \rightarrow n'$ átmenetben kisugárzott fény frekvenciája a következő:

$$\omega = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} = \frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^3} \cdot \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right).$$

Felhasználva, hogy $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$, a kisugárzott fény hullámhosszára az

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{64\pi^3\epsilon_0^2\hbar^3 c} \cdot \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

kifejezést nyerjük. Ez a képlet megegyezik a spektrális szériákat leíró tapasztalati összefüggésekkel és mutatja, hogy az egyes szériák n' értékében különböznek egymástól, vagyis abban, hogy a fény melyik nívóra történő átugrásnál emittálódik. A

képletből leolvasható továbbá, hogy a Rydberg-állandót ismert konstansokon keresztül az

$$R = \frac{me^4}{64\pi^3\epsilon_0^2\hbar^3c}$$

képlet segítségével lehet kifejezni. Ha a jobboldalra a konstansok ismert értékeit beírjuk, valóban az R tapasztalati értékét kapjuk meg.

A Rydberg-állandón keresztül az energiaspektrum kifejezése a következő:

$$E_n = -\frac{Rhc}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (5)$$

3.7. A Bohr-Sommerfeld modell

A Bohr-Sommerfeld modell lényege a Bohr-féle kvantumfeltétel általánosítása. A Bohr-Sommerfeld kvantumfeltétel szerint az I adiabatikus invariánsok (Mechanika jegyzet 32.fejezet) azok, amiket kvantálni kell az

$$I = \frac{1}{2\pi} \oint pdq = \hbar n \quad (6)$$

szabály alapján. Ha az I csak pozitív lehet, az n egész sem lehet negatív (hiszen a klasszikus pályák közül kell kiválasztani a megengedetteket), de ha I előjelére nincs kikötés, n is lehet bármilyen előjelű.

3.8. A harmonikus oszcillátor kvantálása

A mechanikában láttuk, hogy a harmonikus oszcillátorra $I = \frac{E}{\omega}$, ami pozitív szám. A Bohr-Sommerfeld feltétel alapján $I = \hbar n$, ezért az oszcillátor lehetséges energiáit az

$$E_n = \hbar\omega \cdot n \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

képlet fejezi ki Planck eredményével teljes összhangban.

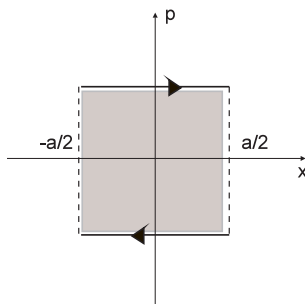
(Emlékeztetünk az $E = \omega I$ képlet levezetésére a Mechanika-jegyzet 32.fejezetéből:

$$\begin{aligned} E &= (\text{virial tétel}) = 2\overline{K} = 2 \cdot \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \frac{m}{2} v^2 dt = \\ &= \frac{1}{T} \int_t^{t+T} p \cdot v dt = \frac{1}{T} \oint p dx = \frac{2\pi}{T} I = \omega I. \end{aligned}$$

3.9. A dobozba zárt tömegpont kvantálása

A „doboz”: a hosszúságú szakasz az x -tengelyen, amelynek végpontjairól („falak”) a tömegpont rugalmasan visszapattan.

Egy tipikus fázisgörbét az ábrán látunk:



4. ábra.

A zárt fázisgörbe által határolt terület nagysága $2pa$, ezért

$$I = \frac{1}{2\pi} 2pa = \hbar n,$$

$$p = \frac{\pi\hbar}{a} n,$$

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (7)$$

1.Feladat: Ábrázoljuk a nívószerkezetet.♣

2.Feladat: Tömegpont a, b, c élhosszúságú dobozba van zárva. Határozzuk meg az energiaspektrumát a Bohr-Sommerfeld modell alapján.

Megoldás: Mialatt a tömegpont rugalmasan "pattog" a falak között, mindegyik fal csak a rá merőleges irányú impulzuskomponenst változtatja meg. Pl. a z -tengelyre merőleges fedőlapról történő visszapattanásnál a (pozitív) p_z értéke $-p_z$ -re változik, de eközben p_x és p_y változatlan marad. Ennek a ténynek egyenes következménye, hogy a fázistrajektória vetülete az (x, p_x) , (y, p_y) , (z, p_z) síkok mindegyikére ugyanolyan jellegű, mint a 4.ábra fázistrajektóriája, és az előző gondolatmenet mindegyikre külön-külön alkalmazható:

$$p_x = \frac{\pi\hbar}{a} n_x \quad p_y = \frac{\pi\hbar}{b} n_y \quad p_z = \frac{\pi\hbar}{c} n_z$$

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{n_x}{a}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{b}\right)^2 + \left(\frac{n_z}{c}\right)^2 \right] \clubsuit \quad (8)$$

3.10. A hidrogénspektrum a Bohr-Sommerfeld modellben

A Mechanika-jegyzet (119) képlete szerint a Kepler-mozgás energiáját az adiabatikus invariánsok függvényében az

$$E = -\frac{\gamma^2 m_1^2 m_2^3}{2(I_r + I_\vartheta + |I_\varphi|)^2}$$

képlet adja meg. A gravitációs potenciálból

$$\gamma m_1 m_2 \longrightarrow \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \quad (9)$$

helyettesítéssel kapjuk meg a Coulomb-potenciált a hidrogénatom planetáris modelljében, ezért — a megfelelő változtatással — a képlet ebben a modellben is érvényes:

$$E = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2(I_r + I_\vartheta + |I_\varphi|)^2}$$

(a bolygó m_2 tömegét átjelöltük az elektron m tömegére).

A Bohr-Sommerfeld kvantálási feltételek alapján

$$I_r = \hbar n_r, \quad I_\vartheta = \hbar n_\vartheta, \quad I_\varphi = \hbar m,$$

ahol n_r és n_ϑ nemnegatív egész számok, m pedig tetszőleges előjelű egész². Így

$$I_r + I_\vartheta + |I_\varphi| = \hbar(n_r + n_\vartheta + |m|) = -\pi\hbar(n_r + l),$$

ahol — a következő fejezetre gondolva, — bevezettük az

$$l = n_\vartheta + |m|$$

jelölést. Ha ezt a kifejezést az energia képletébe beírjuk, az

$$E = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{(n_r + l)^2}$$

formulára jutunk. Amikor $n_r = l = 0$, az energia minusz végtelen, mert az elektron az origóban nyugszik. Ezt a lehetőséget nyilván ki kell zárunk. A legegyszerűbben ezt úgy érhetjük el, hogy a zárójelen belüli összeghez hozzáadunk 1-t. Célszerű ezután bevezetni az

$$n = n_r + l + 1$$

²Az n_φ kvantumszámot m -el szokás jelölni, noha megvan a veszélye, hogy összekeverjük a tömeggel.

kvantumszámot, amelynek a segítségével az energia az

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

alakra hozható, ami pontosan azonos (4)-el.

Terminológia: n - főkvantumszám, n_r - radiális kvantumszám, l - mellékvantumszám, m - mágneses kvantumszám.

Megjegyzés: A kvantummechanika nem tud számot adni az elektronok átugrásáról az alacsonyabb energiájú pályákra. Ez a jelenség ugyanis a sugárzási visszahatás kvantummechanikai megfelelője, ezért csak az elektromágneses mező figyelembevételével tárgyalható. Ez azonban már a kvantumelektrodinamika hatáskörébe tartozik, amely nem szerepel a tantervben.

3.11. Az impulzusmomentum a Bohr-Sommerfeld modellben

Bohr eredeti kvantumfeltétele az volt, hogy a megengedett körpályák azok, amelyeken az impulzusnyomaték értéke \hbar egész számú többszöröse. Ebben a fejezetben ezt a feltevést pontosítjuk a Bohr-Sommerfeld modell szerint.

A Mechanika jegyzet 1.14 fejezetében láttuk, hogy p_φ fizikai jelentése az impulzusmomentum z -komponense (amelyet L_z -vel is szoktunk jelölni). Mivel $p_\varphi = I_\varphi$, ebből következik, hogy az impulzusmomentum z -komponense kvantált, értéke $\hbar m$, ahol m tetszőleges előjelű egész vagy nulla.

Megmutatjuk, hogy az impulzusmomentum L abszolút értéke ("hossza") is csak kvantált értékeket vehet föl. Az egyszerűség kedvéért r sugarú gömbön végzett szabad mozgás impulzusmomentumát vizsgáljuk. Induljunk ki az

$$L^2 = m^2 r^2 v^2 = m^2 r^4 (\dot{\vartheta}^2 + \sin^2 \vartheta \cdot \dot{\varphi}^2)$$

képletből. A Mechanika jegyzet 79.feladata mintájára

$$\dot{\vartheta} = \frac{1}{mr^2} p_\vartheta \quad \dot{\varphi} = \frac{1}{mr^2 \sin^2 \vartheta} p_\varphi,$$

ezért

$$L^2 = mr^2 (p_\vartheta \cdot \dot{\vartheta} + p_\varphi \cdot \dot{\varphi}).$$

A gömbfelületen a szabad mozgás főkörön történik (Mechanika jegyzet 4.feladat) konstans impulzusmomentum mellett, ezért

$$\begin{aligned} L^2 &= \frac{1}{T} \int_t^{t+T} L^2 dt = \frac{mr^2}{T} \int_t^{t+T} (p_\vartheta \dot{\vartheta} + p_\varphi \dot{\varphi}) = \frac{mr^2}{T} \left[\oint p_\vartheta d\vartheta + \left| \oint p_\varphi d\varphi \right| \right] = \\ &= m \cdot \frac{2\pi r}{T} \cdot r [I_\vartheta + |I_\varphi|]. \end{aligned}$$

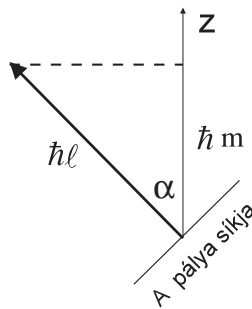
A jobboldali zárójelet szorzó $m \cdot \frac{2\pi r}{T} \cdot r$ faktor nem más, mint L , ezért az impulzusmomentum nagyságát az

$$L = I_{\vartheta} + |I_{\varphi}|$$

egyszerű összefüggés határozza meg, amelynek következtében a Bohr-Sommerfeld modellben

$$L = \hbar(n_{\vartheta} + |m|) = \hbar l.$$

Mint látjuk, a Bohr-Sommerfeld kvantumfeltételek szerint az impulzusnyomaték nagysága csak a \hbar egész számú többszöröse lehet.



5. ábra.

Az n_{ϑ} nemnegatív egész, ezért ha l adott, az m -nek az

$$-l \leq m \leq l \quad (10)$$

intervallumba kell esnie: $|L_z|$ nem lehet nagyobb L -nél. Adott l -jű és m -jű pálya síkjára állított merőleges $\cos \alpha = m/l$ által meghatározott α szöget zár be a z -tengellyel, u.i. az impulzusmomentum nagysága $\hbar l$, z -re vetett vetülete pedig $\hbar m$ (ld. az 5. ábrát). Az α szög tehát kvantált, ezt a tényt nevezték a régi kvantumelméletben *térbeli kvantálásnak*. Megjegyezzük, hogy a térbeli kvantálás nyilvánvaló ellentmondásban van azzal a ténnyel, hogy a z -tengely csupán elképzelt irány a térben és bárhogyan felvehető: nehéz megérteni, hogy adott pályasík mellett miért nem „szabad” tetszőlegesen orientálni a koordinátarendszert.

Adott l mellett az (10)-t kielégítő különböző m -k száma $2l + 1$. Adott $\hbar l$ nagyságú impulzusmomentum vektor ennyi egymástól különböző z -vetületű orientációval rendelkezhet.

Ha egy bizonyos kvantumszámhoz ν különböző kvantumállapot tartozik, akkor az illető kvantumszámot ν -ször *elfajultnak* nevezzük. Az l kvantumszám elfajulása $\nu_l = 2l + 1$.

3. Feladat: Hányszor elfajult a hidrogénatom n főkvantumszáma?

Megoldás: Az n

$$\nu_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$$

-szeresen elfajult, mivel adott n -nél n_r egyértelműen meghatározza l -t, amely a $0 \leq l \leq n-1$ tartományba eső egész, és minden l -nél $(2l+1)$ féleképpen választhatjuk meg m -t. ♣

A Bohr-modellel ellentétben a Bohr-Sommerfeld modell figyelembe veszi, hogy a hidrogénatomban az elektrópályák ellipszisek is lehetnek. A Mechanika jegyzet 54.feladatában láttuk, hogy adott E mellett a nagytengely hossza állandó, az L értéke pedig a nulla és egy maximális érték között lehet, amely fordítva arányos $|E|$ négyzetgyökével (mivel $E < 0$, az E növekedésével $|E|$ csökken, ezért az L maximális lehetséges értéke E növekedésével nő). A Bohr-Sommerfeld modellben lényegében ugyanez a helyzet. Az L -t meghatározó l kvantumszám minimális értéke nulla, maximális értéke pedig $(n-1)$, ami annál nagyobb, minél nagyobb $|E_n|$ négyzetgyökének inverze (az n főkvantumszám).

Az adott n -hez tartozó kvantumállapotok tehát olyan ellipszispályák, amelyeknek ugyanolyan hosszú a nagytengelye, és annál elnyújtottabbak, minél kisebb az l . A köralakú pályáknál $l = n-1$.

4.Feladat: Kvantáljuk az izotróp harmonikus oszcillátor mozgását.

Megoldás: A viriál tétel szerint $E = 2\bar{K}$.

A feladat Descartes-koordinátákban is, polárkoordinátákban is megoldható.

a) Descartes-koordináták:

$$\begin{aligned} E &= \frac{2}{T} \int_t^{t+T} \left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} \right) dt = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} (p_x v_x + p_y v_y + p_z v_z) dt = \\ &= \frac{1}{T} \left(\oint p_x dx + \oint p_y dy + \oint p_z dz \right) = \frac{2\pi}{T} (I_x + I_y + I_z) = \omega (I_x + I_y + I_z) = \hbar \omega \cdot n, \end{aligned}$$

ahol $n = n_x + n_y + n_z$ három nemnegatív kvantumszám összege. Az n kvantumszámú nívó elfajulása

$$\nu_n = \binom{n+2}{2} = \frac{(n+2)(n+1)}{2}.$$

b) Gömbi-koordináták:

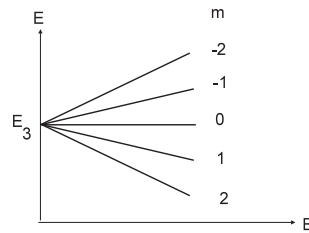
Figyelembe kell venni, hogy az r -mozgás periódusa $T/2$ (Mechanika, 59.feladat), ezért

$$E = \frac{2}{T} \int_t^{t+T} \left(\frac{m}{2} \dot{r}^2 + \frac{m}{2} r^2 \dot{\vartheta}^2 + \frac{m}{2} r^2 \sin^2 \vartheta \cdot \dot{\varphi}^2 \right) dt = \frac{2\pi}{T} (2I_r + I_\vartheta + I_\varphi) = \hbar \omega \cdot n,$$

ahol $n = 2n_r + l$. Az alacsony n -k példáján meggyőződhetünk róla, hogy az elfajulás ugyanaz, mint az előző megoldásban.♣

3.12. A Zeemann-effektus

Az effektus lényege: a mágneses mező az m kvantumszám szerint felhasítja az energianívókat (ezért nevezik m -t mágneses kvantumszámmak).



6. ábra.

Az atomok mozgó töltéseket tartalmaznak, ezért általában van mágneses dipólnyomatékuk. Az Elektrodinamika jegyzet 2.19 fejezete szerint a köráram $\vec{\mu}$ mágneses dipólnyomatéka merőleges az áram síkjára és nagysága az áramerősség és a kontúr által határolt terület szorzata. A hidrogénatomban keringő elektron árama az e töltés és a $\nu = 1/T$ keringési frekvencia szorzata, ezért

$$\mu = \pi ab \cdot \frac{e}{T}.$$

A $\pi ab/T$ arány nem más, mint a területi sebesség. A Mechanika jegyzet 44.feladatában láttuk, hogy ez a 2.Kepler-törvény szerint $L/2m$ -el egyenlő. Mivel továbbá az \vec{L} impulzusnyomaték is merőleges a pályasíkra, ezért

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2m} \vec{L}.$$

A mágneses dipól potenciális energiáját az elektromos dipóléból kapjuk (Elektrodinamika jegyzet (46) képlet) $\vec{p} \rightarrow \vec{\mu}$, $\vec{E} \rightarrow \vec{B}$ helyettesítéssel:

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}.$$

Válasszuk a z -tengelyt a \vec{B} -vel párhuzamosan. Akkor

$$U = -\mu_z B = -\frac{e}{2m} L_z B = -\mu_B \cdot m B,$$

ahol $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ a *Bohr-magneton* (m az elektron tömege), a B -t szorzó m pedig a mágneses kvantumszám.

Ha a mágneses mező gyenge, akkor az elektron mozgására gyakorolt hatásától eltekinthetünk, és a változatlan Bohr-pályák energiáját úgy kaphatjuk meg, hogy (4)-hez hozzáadjuk az U potenciális energiát (perturbatív tárgyalás):

$$E_{nm} = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} - \mu_B \cdot mB.$$

Adott n -nél l maximális értéke $(n-1)$, ezért az E_n szint $(2(n-1)+1) = (2n-1)$ alnívóra hasad fel az m mágneses kvantumszám szerint (ld. a 6.ábrát).

3.13. A Bohr-Sommerfeld modell kritikája

A Bohr-Sommerfeld modell gyenge pontjai a következők:

1) Az előírás nem elég általános, mert az adiabatikus invariánsokat csak integrálható feladatokra értelmeztük (Mechanika jegyzet 17§). A módszert egynél több elektront tartalmazó atomokra nem lehet alkalmazni, mert ezek a feladatok nem integrálhatók.

2) A térbeli kvantálás értelme homályos.

3) A hidrogénspektrum számításánál mesterségesen ki kell zárni azt a lehetőséget, amikor n_r , n_ϑ és m egyidejűleg zérus, noha a Bohr-Sommerfeld eljárással ez összeférne.

4) A modell ellentmond a spektrális hasonlóság elvének (Elektrodinamika, 2.39 fejezet), amely szerint egy periódikus mozgást végző töltés által kibocsátott sugárzás spektruma csak a töltés mozgási frekvenciáját és felharmónikusait tartalmazhatja.

Az utolsó pontot vizsgáljuk részletesebben. Legyen $E_{n'} < E_n$ ($n' < n$). Az $n \rightarrow n'$ átmenet során emittált fény frekvenciája a (5) felhasználásával

$$\omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \left[-\frac{Rhc}{n^2} + \frac{Rhc}{n'^2} \right] = 2\pi Rc \left[\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right]. \quad (11)$$

A sugárzás az n kvantumszámú pályáról történik. Az elektron mozgásának

$$T = \text{ellipszis területe/területi sebesség} = \pi ab \cdot \frac{2m}{|L_z|}$$

periódusidejét a Mechanika jegyzet 19.fejezet képletei segítségével könnyen kifejezhetjük az E energián keresztül:

$$T = \frac{2\pi\mu ab}{|L_z|} = \frac{2\pi\mu}{|L_z|} \cdot \frac{\gamma m_1 m_2}{2|E|} \cdot \frac{|L_z|}{\sqrt{2\mu|E|}} = \sqrt{\frac{\mu}{2}} \cdot \frac{\gamma m_1 m_2}{|E|^{3/2}}.$$

A (9) helyettesítés elvégzése után ezt kapjuk³:

$$T = \sqrt{\frac{m}{2}} \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|E|^{3/2}},$$

³A μ redukált tömeg $m_1 \ll m_2$ -nél $m_1 \equiv m$ -el egyenlő.

ezért az elektron mozgásának körfrekvenciája az n főkvantumszámú pályán⁴

$$\omega_n = \frac{2\pi}{T_n} = 2\pi \cdot \sqrt{\frac{2}{m}} \cdot \frac{4\pi\epsilon_0|E_n|^{3/2}}{e^2} = 4\pi cR \cdot \frac{1}{n^3}. \quad (12)$$

Nyilvánvaló, hogy $\omega_{nn'} \neq (\text{egész szám}) \times \omega_n$, és ezért a spektrális hasonlóság elve valóban sérül.

3.14. A korrespondencia-elv (Bohr 1918)

A fenti bíráló nem feledtetheti el, hogy a Bohr-Sommerfeld modell rendkívül eredményes a hidrogénspektrum és a Zeemann-effektus értelmezésében. Ha nem is tekinthető a mikrojelenségek végleges elméletének, annyit mindenesetre meggyőzően jelez, hogy a newtoni mechanika és a Maxwell-féle elektrodinamika az atomi jelenségek szintjén bizonyosan nem érvényes. A makroszkopikus jelenségek értelmezésében azonban ez a két nagy elmélet sikeresnek és nélkülözhetetlennek bizonyult. Ezért minden olyan elmélettől, amely a mikrojelenségek értelmezésének az igényével lép fel, meg kell követelni, hogy amikor olyan viszonyokra alkalmazzuk, amelyben a newtoni mechanika, ill. a klasszikus elektrodinamika eredményes volt, praktikus legyen redukálható ezekre az elméletekre. Ezt az elvárást nevezzük *korrespondencia elvnek*⁵.

Vegyük például a hidrogénspektrumnak azt a részét, amely nagy n értékekhez tartozik és a nullához közeli (negatív) energiájú nívókat tartalmazza (a satírozott tartomány a 3.ábrán). Az energiaszintek itt nagyon sűrűn helyezkednek el, az energia csaknem folytonosan vehet fel bármely értéket és ezért ebben az u.n. *korrespondencia-limeszben* a kvantumelmélet következtetései praktikusán egybe kell esnie a klasszikus mechanika és elektrodinamika követelményeivel. Mindenekelőtt teljesülnie kell a spektrális hasonlóság elvének azokban az átmenetekben, amelyek nagy n főkvantumszámú nívók között történnek.

Legyen $n, n' \gg n - n' \equiv m$ (m pozitív egész). Az $m/n \ll 1$ arány első rendjében

$$\frac{1}{n'^2} = \frac{1}{(n-m)^2} = \frac{1}{n^2} \cdot \frac{1}{\left(1 - \frac{m}{n}\right)^2} \approx \frac{1}{n^2} \cdot \frac{1}{1 - 2\frac{m}{n}} \approx \frac{1}{n^2} \left(1 + 2\frac{m}{n}\right).$$

Írjuk be ezt (11)-be:

$$\omega_{nn'} \approx 2\pi Rc \left[\frac{1}{n^2} \cdot \left(1 + 2\frac{m}{n}\right) - \frac{1}{n^2} \right] = m \cdot \frac{4\pi Rc}{n^3} = (12) = m \cdot \omega_n,$$

vagyis az n kvantumszámú nívóról kisugárzott fény frekvenciája a korrespondencia-limeszben valóban egész számú többszöröse a szóbanforgó kvantumállapotban keringő

⁴A (12) igazolásánál először E_n -t ki kell fejezni a (3) segítségével, majd a konstansokat össze kell csoportosítani R -be.

⁵A korrespondencia szó itt *megfeleltetést* jelent és az új elméletnek a bevált régihez való illeszkedését fejezi ki.

elektron körfrekvenciájának. Az $n \rightarrow n - m$ átugrásnál a kisugárzott fény körfrekvenciája az ω_n alapfrekvencia m -k felharmónikusa.

A régi kvantumelmélet ismertetését befejeztük és a (modern) kvantummechanikához szükséges matematikai előkészítésre térünk át.

3.15. A vektortér

A vektorteret az origóból felmért vektorok összesége alkotja. Két és három dimenzióban ($D = 2, 3$) a vektortér alaptulajdonságai jól ismertek és tetszőleges D -nél érvényesek. A továbbiak megértéséhez elegendő az, amit a vektorokról intuitíve elképzelünk, de a határozottság kedvéért pontokba szedjük a vektorterek alaptulajdonságait. Ezek a következők:

I. A vektorok összeadhatók, és az összeadás a következő tulajdonságokkal rendelkezik:

- 1) $\vec{a} + \vec{b} = \vec{b} + \vec{a}$ (kommutativitás).
- 2) $(\vec{a} + \vec{b}) + \vec{c} = \vec{a} + (\vec{b} + \vec{c})$ (asszociativitás)
- 3) A vektortér elemei között ott van a $\vec{0}$ nullvektor, amelyre $\vec{a} + \vec{0} = \vec{a}$.
- 4) Minden \vec{a} -hoz tartozik olyan \vec{b} , hogy $\vec{a} + \vec{b} = \vec{0}$ ($\vec{b} = -\vec{a}$).

II. Szorzás valós számmal: Ha α, β valós számok, akkor

- 1) \vec{a} mellett $\alpha\vec{a}$ is vektor. Speciálisan $1 \cdot \vec{a} = \vec{a}$.
- 2) $\alpha(\beta\vec{a}) = (\alpha\beta)\vec{a}$.

III. Az összeadás és a szorzás disztributív:

- 1) $(\alpha + \beta)\vec{a} = \alpha\vec{a} + \beta\vec{a}$.

A *lineáris függetlenség* fogalma: $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \dots$ akkor lineárisan független, ha

$$\alpha\vec{a} + \beta\vec{b} + \gamma\vec{c} + \dots = \vec{0} \implies \alpha = \beta = \gamma \dots = 0,$$

vagyis ha egyik vektor sem fejezhető ki a sorozat többi vektorának lineárkombinációjaként. D dimenzióban a maximális mennyiségű lineárisan független vektorok száma D -vel egyenlő, ez a tulajdonság szolgálhat a dimenzió fogalmának definíciójaként.

A *bázis* fogalma: D db lineárisan független \vec{e}_i ($i = 1, 2, \dots, D$) a D -dimenziós vektortér bázisát alkotja. Az $\vec{a} = a_1\vec{e}_1 + a_2\vec{e}_2 + \dots + a_D\vec{e}_D$ kifejtés egyértelmű. Az a_i -k az \vec{a} *vetületei* az \vec{e}_i bázisban: $\vec{a} = (a_1, a_2, \dots, a_D)$. Az \vec{a} vektor \vec{e}_i irányú *komponense* az $a_i\vec{e}_i$ vektor.

Fontos megjegyzés: Figyeljük meg, hogy \vec{e}_i -ben és a_i -ben az i index különböző funkciót tölt be: az első esetben D különböző vektor közül kijelöli az i -ediket (az e_i

összetett szimbólum egészben tölti be azt a szerepet, amit \vec{a} -nál az a betű), az utóbbiban egy adott vektor vetületei közül jelöli ki az i -ediket. Ezért az \vec{e}_i j -ik vetületét e_{ij} -vel logikus jelölni.

A *skalárszorzat*: jelölés $\vec{a} \cdot \vec{b}$ helyett inkább (\vec{a}, \vec{b}) .

A skalárszorzat valós szám, amelyet a következő tulajdonságaival definiálunk:

1) Szimmetria: $(\vec{a}, \vec{b}) = (\vec{b}, \vec{a})$.

2) Pozitivitás: $(\vec{a}, \vec{a}) \geq 0$, $(\vec{a}, \vec{a}) = 0 \iff \vec{a} = \vec{0}$.

A $\sqrt{(\vec{a}, \vec{a})} \equiv |\vec{a}|$ az \vec{a} *normája* (hossza).

3) Bilinearitás: $(\vec{a}, \beta\vec{b} + \gamma\vec{c}) = \beta(\vec{a}, \vec{b}) + \gamma(\vec{a}, \vec{c})$, és a szimmetria következtében $(\beta\vec{b} + \gamma\vec{c}, \vec{a}) = \beta(\vec{b}, \vec{a}) + \gamma(\vec{c}, \vec{a})$.

A skalárszorzat szolgál a vektorok *ortogonalitásának* értelmezésére:

$$\vec{a} \perp \vec{b} \iff (\vec{a}, \vec{b}) = 0.$$

Az $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_D$ bázist *ortonormálnak* nevezzük, ha 1-re normáltak és egymásra ortogonálisok:

$$(\vec{e}_i, \vec{e}_j) = \delta_{ij}. \quad (13)$$

A δ_{ij} a *Kronecker-szimbólum*, amely $i = j$ -nél 1 (a bázis elemei *normáltak*), egyébként 0 (a különböző báziselemek ortogonálisak egymásra).

5. Feladat: Bizonyítsuk be, hogy ortonormált bázisban

$$(\vec{a}, \vec{b}) = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \dots + a_D b_D. \clubsuit$$

A vektortérben végtelen sok különböző ortonormált bázis létezik, amelyek egymás elforgatottjai. Mivel (13) mindre egyaránt érvényes, a skalárszorzat az elforgatásokra nézve invariáns, *bármely* ortogonális bázisban egyenlő a komponensekből alkotott szorzatok összegével.

Megjegyzés: Vektorszorzatot nem definiálunk, mert nem általánosítható $D > 3$ -ra természetes módon.

6. Feladat: Igazoljuk, hogy ortonormált bázisban

$$a_i = (\vec{e}_i, \vec{a}). \clubsuit \quad (14)$$

Megjegyzés: Speciálisan maguknak a bázist alkotó vektoroknak a vetülete a bázis \vec{e}_i elemére a következő:

$$e_{ji} \equiv (\vec{e}_j)_i \stackrel{(14)}{=} (\vec{e}_i, \vec{e}_j) = \delta_{ij} \quad (j = 1, 2, \dots, D), \quad (15)$$

azaz egy ortonormált bázis vektorainak *önmagára* vonatkoztatott komponensei a következők:

$$\vec{e}_1 = (1, 0, 0, \dots, 0) \quad \vec{e}_2 = (0, 1, 0, \dots, 0) \quad \dots \quad \vec{e}_D = (0, 0, 0, \dots, 1). \quad (16)$$

7.Feladat: Igazoljuk, hogy ortonormált bázisban

$$\sum_{i=1}^D (\vec{a}, \vec{e}_i) \cdot (\vec{e}_i, \vec{b}) = (\vec{a}, \vec{b}). \clubsuit \quad (17)$$

8.Feladat: Legyen \vec{e}_i ortonormált bázis $D = 3$ -nál, amelyben

$$\begin{aligned} \vec{a} &= (5, -3\sqrt{3}, 2\sqrt{3}) \\ \vec{b} &= (3\sqrt{3}, 1, -6) \\ \vec{c} &= (\sqrt{3}, 3, 2). \end{aligned}$$

Igazoljuk, hogy ezek a vektorok ortogonálisak egymásra. Normáljuk át őket úgy, hogy egy $\vec{\eta}_i$ ortonormált bázist alkossanak.

$$\text{Megoldás: } \vec{\eta}_1 = \frac{1}{8}\vec{a}, \vec{\eta}_2 = \frac{1}{8}\vec{b}, \vec{\eta}_3 = \frac{1}{4}\vec{c} \clubsuit.$$

9.Feladat: Adjuk meg az \vec{e}_i -k vetületeit az $\vec{\eta}_i$ bázisban.

Megoldás: A feladat az

$$\vec{e}_i = (\vec{\eta}_1, \vec{e}_i)\vec{\eta}_1 + (\vec{\eta}_2, \vec{e}_i)\vec{\eta}_2 + (\vec{\eta}_3, \vec{e}_i)\vec{\eta}_3$$

képlet segítségével oldható meg, amely (14) következménye. \clubsuit

3.16. Komplex vektortér

A komplex vektortér abban különbözik az előző fejezet (valós) vektorterétől, hogy a II, III-ban szereplő (görög betűs) konstansok komplexek. Ennek következtében a vektorok vetületei is komplex számok.

Másik különbség az, hogy a skalárszorzat nem szimmetrikus, hanem *hermitikus*:

$$(\vec{a}, \vec{b}) = (\vec{b}, \vec{a})^*$$

. Ez a definíció biztosítja, hogy (\vec{a}, \vec{a}) megmarad valósnak (és ezért értelmes rá a pozitívítás megkövetelése), de a bilinearitás formáját megváltoztatja: ha az $(\vec{a}, \beta\vec{b} + \gamma\vec{c}) = \beta(\vec{a}, \vec{b}) + \gamma(\vec{a}, \vec{c})$ tulajdonságot továbbra is érvényesnek fogadjuk el, akkor a hermiticitás következtében $(\beta\vec{b} + \gamma\vec{c}, \vec{a}) = \beta^*(\vec{b}, \vec{a}) + \gamma^*(\vec{c}, \vec{a})$: amikor egy konstansot a skalárszorzat *első tényezőjéből* emelünk ki, komplex konjugálni kell.

A bázis ortonormáltságát változatlanul (13) fejezi ki.

10.Feladat: Bizonyítsuk be, hogy ortonormált bázisban

$$(\vec{a}, \vec{b}) = a_1^*b_1 + a_2^*b_2 + \dots + a_D^*b_D). \clubsuit \quad (18)$$

A skalárszorzatnak ez az alakja mutatja, hogy (16) komplex vektortérben is érvényes.

11.Feladat: Igazoljuk, hogy (14), (15) komplex vektortérben is érvényes.

Megjegyzés: Komplex vektortér esetén (14) skalárszorzatában a tényezők sorrendje lényeges. Valós vektortérnél ez a sorrend nem játszik szerepet.♣

12.Feladat: Igazoljuk, hogy (17) komplex vektortérben is érvényes.♣

13.Feladat: Válasszuk ki az egymásra ortogonális párokat a $D=2$ komplex vektortér következő vektorai közül: $\vec{a} = (1, 1)$, $\vec{b} = (1, i)$, $\vec{c} = (1, -1)$, $\vec{d} = (1, -i)$.

Megoldás: $(\vec{a}, \vec{c}) = (\vec{b}, \vec{d}) = 0$ ♣.

3.17. A Hilbert-tér

A végtelen dimenziós ($D = \infty$) komplex vektorteret *Hilbert-térnek* nevezzük. A Hilbert-teret \mathcal{H} -val jelöljük.

A végtelen számú komponens következtében vannak olyan vektorok, amelyeknek minden komponense véges, a normájuk mégis végtelen. Az ilyen vektorokat *nem normálható vektoroknak* nevezzük. Az elnevezés oka az, hogy véges normájú vektorokat $|\vec{a}|^{-1/2}$ -el történő szorzással mindig 1-re lehet normálni. A vektort egyszerűen csak *normálnak* nevezzük, ha a normája 1-el egyenlő (ha 1-re normált).

14.Feladat: Vizsgáljuk az $a_n = 1/n$ és a $b_n = 1/\sqrt{n}$ komponensekkel ($n = 1, 2, \dots$) megadott \vec{a} , \vec{b} vektorok normálhatóságát.

Megoldás: $|\vec{a}| = \frac{\pi}{\sqrt{6}} < \infty$, $|\vec{b}| = \infty$.♣

A Hilbert-tér bázisai két nagy osztályra bonthatók, a *diszkrét és a folytonos bázisok* osztályára.

A diszkrét bázis \vec{e}_i elemeit — a véges dimenziójú vektorterek báziselemeihez hasonlóan —, egy i egész számmal indexelhetjük, amely az 1 és a D között (Hilbert-térnél $D = \infty$) veheti fel az értékeit. Diszkrét bázis használatakor az előző fejezet összes képlete érvényes ($D = \infty$ -el).

A folytonos bázis \vec{e}_u elemeit az u folytonos paraméter indexeli. Az u megadott intervallumban változhat. A továbbiakban feltesszük, hogy — ha nem írunk elő valami mást, — ez az intervallum a $-\infty < u < +\infty$. Folytonos bázis használatakor az előző fejezet képletei érvényesek maradnak, ha az összegzéseket integrálással helyettesítjük:

$$\sum_{i=1}^D \implies \int_{-\infty}^{\infty} du \equiv \int du.$$

Így például

$$\vec{a} = \sum_{i=1}^D a_i \vec{e}_i \implies \vec{a} = \int du \cdot a_u \vec{e}_u$$

$$(\vec{a}, \vec{b}) = \sum_{i=1}^D a_i^* b_i \quad \Longrightarrow \quad (\vec{a}, \vec{b}) = \int du \cdot a_u^* b_u. \quad (19)$$

Az u helyett természetesen más betű is használható. Alább u mellett többnyire a v -t használjuk majd a folytonos bázis vetületeinek indexelésére.

Az ortonormáltságot folytonos bázisoknál a *deltára normáltság* helyettesíti⁶:

$$(\vec{e}_u, \vec{e}_{u'}) = \delta(u - u'). \quad (20)$$

Mivel $\delta(0) = \infty$, a folytonos bázis \vec{e}_u báziselemei nem normálhatók, de $u \neq u'$ -nél ortogonálisak egymásra.

A vektorok folytonos bázisra vonatkozó vetületei a bázist indexelő folytonos paraméter *függvényei*, és ezért sokszor célszerű az a_u jelölést $a(u)$ -val helyettesíteni, ami kidomborítja a függvény-jelleget. Így pl. írhatjuk, hogy

$$\vec{a} = \int du \cdot a(u) \vec{e}_u.$$

15.Feladat: Az $\vec{a} \in \mathcal{H}$ vektor folytonos bázisban megadott komponense legyen az $a(u) = e^{-|u|}$ függvény. Számítsuk ki a normáját.

Megoldás:

$$|\vec{a}|^2 = \int du \cdot |a(u)|^2 = 2 \int_0^\infty du \cdot e^{-2u} = 1,$$

\vec{a} tehát normált ♣.

16.Feladat: Mutassuk meg, hogy az előző feladat \vec{a} -ja és az $ue^{-|u|}$ komponensű \vec{b} ortogonális egymásra. ♣

Hogyan lehet megadni a folytonos bázis \vec{e}_u bázisvektorainak komponenseit ugyanabban a bázisban? Más szavakkal: mi a (15) képlet megfelelője folytonos bázisban?

A (15) szerint az \vec{e}_i minden e_{i1}, e_{i2}, \dots vetülete zérus egy kivételével: az a vetület, amelynek sorszáma azonos a bázisvektor nevében szereplő i -vel, 1-el egyenlő. Ez biztosítja (13) teljesülését.

Folytonos bázisban az okozza a problémát, hogy a vetületek "sorszáma" nem korlátozódik a pozitív egészekre, hanem tetszőleges valós szám lehet. Hogyan lehet ebben az esetben értelmesen megfogalmazni azt a követelményt, hogy \vec{e}_u minden $e_u(v)$ vetülete (v tetszőleges valós) zérus, kivéve, amikor $v = u$? Ráadásul ennek úgy kell történnie, hogy biztosítsa a deltára normáltság (20) feltételét.

A megoldás a következő:

$$e_u(v) = \delta(u - v). \quad (21)$$

Ebből ugyanis következik, hogy az \vec{e}_u és az $\vec{e}_{u'}$ skalárszorzata a skalárszorzat (19) definíciója alapján

$$(\vec{e}_u, \vec{e}_{u'}) = \int dv \cdot e_u^*(v) e_{u'}(v) = \int dv \cdot \delta(u - v) \delta(u' - v) = \delta(u - u'),$$

⁶A delta-függvényt az Elektrodinamika jegyzet 3.fejezetében vezettük be.

és ez a képlet valóban azonos (20)-al.

17.Feladat: Igazoljuk, hogy a (14) képlet folytonos megfelelője az

$$a(u) = (\vec{e}_u, \vec{a})$$

formula. ♣

Megjegyzés a jelölésről: A \mathcal{H} vektorait a kvantumelméletben többnyire a görög ABC végéről vett betűkkel jelölik: $\vec{\phi}, \vec{\chi}, \vec{\psi}$. A nyilat azonban sohasem szokták kitenni, mert fenntartják a geometriai vektorok jelölésére. Helyette leggyakrabban a Dirac által bevezetett *ket-vektor* jelölést használják: $\vec{\phi} \equiv |\phi\rangle$. A $|\phi\rangle$ és a $|\psi\rangle$ ket-vektorok skalárszorzata a két jelölésmódban a következő: $(\vec{\phi}, \vec{\psi}) \equiv \langle\phi|\psi\rangle$. A $\langle\phi|$ neve *bra-vektor*. A furcsa de nagyon szerencsés elnevezés magyarázata az, hogy a $\langle\Phi|\Psi\rangle$ skalárszorzat egy teljes *zárójel (bra-c-ket)*.

Ebben a bevezető kurzusban a Hilbert-tér vektorait továbbra is nyíllal fogjuk megjelölni, mert fontosabbnak tartjuk hangsúlyozni a geometriai vektorokkal való hasonlóságukat, mint a közöttük lévő különbségeket.

3.18. Lineáris operátorok

Az *operátor* a függvényfogalom kiterjesztése vektorterekre (tetszőleges D -nél). Minden olyan szabályt operátornak nevezünk, amely vektorhoz vektort rendel: $\vec{b} = f(\vec{a})$.

A továbbiakban csak *lineáris operátorokkal* fogunk találkozni, amelyek a lineáris függvény analógonjai.

Az $f(x)$ -t akkor nevezük lineárisnak⁷, ha igaz rá az $f(x) + f(y) = f(x + y)$ függvényegyenlet. Ezt az egyenletet a *konstans* $\times x$ függvények elégítik ki.

Az $f(\vec{a})$ operátort — hasonlóan —, akkor nevezük lineárisnak, ha

$$f(\vec{a}) + f(\vec{b}) = f(\vec{a} + \vec{b}).$$

Ha f lineáris, az \vec{a} -ra való hatását $f(\vec{a})$ helyett $\hat{f}\vec{a}$ -val jelöljük. Ez mutatja a hasonlóságot a konstanssal való szorzással, de jelzi azt is, hogy (az \vec{a} -tól független) \hat{f} általában nem egyszerűen egy konstans szorzó. A linearitás feltétele ebben a jelölésben

$$\hat{f}\vec{a} + \hat{f}\vec{b} = \hat{f}(\vec{a} + \vec{b}). \quad (22)$$

Az \hat{f} általános formája diszkrét bázisban

$$\vec{b} = \hat{f}\vec{a} \iff b_i = \sum_{j=1}^D f_{ij} a_j, \quad (23)$$

ahol D lehet végtelen is. Látjuk, hogy egy \hat{f} lineáris operátort D^2 db $f_{ij} \equiv (\hat{f})_{ij}$ számmal (*mátrixelemmel*) lehet megadni.

⁷Pontosabban: homogén lineárisnak.

A (23)-al ekvivalens az operátor mátrixszal történő felírása. $D = 3$ -nál például

$$\hat{f} = \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & f_{13} \\ f_{21} & f_{22} & f_{23} \\ f_{31} & f_{32} & f_{33} \end{pmatrix},$$

$$\vec{b} = \hat{f}\vec{a} \iff \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & f_{13} \\ f_{21} & f_{22} & f_{23} \\ f_{31} & f_{32} & f_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}.$$

A *sor*×*oszlop* szabály alapján $b_i = f_{i1}a_1 + f_{i2}a_2 + f_{i3}a_3$, és ez valóban azonos a (23)-beli szabállyal.

18.Feladat: Igazoljuk, hogy $f_{ij} = (\vec{e}_i, \hat{f}\vec{e}_j)$.

Igazolás:

$$(\vec{e}_i, \hat{f}\vec{e}_j) \stackrel{(14)}{=} (\hat{f}\vec{e}_j)_i \stackrel{(23)}{=} \sum_{k=1}^D f_{ik}(\vec{e}_j)_k \stackrel{(15)}{=} \sum_{k=1}^D f_{ik}\delta_{jk} = f_{ij} \clubsuit$$

A lineáris operátor (23) alakja folytonos bázisban is érvényes, ha az összegzést integrálással helyettesítjük:

$$\vec{b} = \hat{f}\vec{a} \iff b(u) = \int dv \cdot f(u, v)a(v). \quad (24)$$

A diszkrét bázis i, j indexpárját az u, v folytonos indexpárral kellett helyettesítenünk. A vetületek függvények formájában írtuk fel.

Látjuk, hogy folytonos bázisban egy \hat{f} lineáris operátort az $f(u, v)$ kétváltozós függvénnyel adhatjuk meg. Folytonos bázisban azonban — a diszkrét bázishoz képest — olyan speciális lehetőségek is rendelkezésre állnak lineáris operátorok képzésére, mint pl. a vetület-függvény deriválása, vagy szorzás a vetület-függvény argumentumával. A következő két feladat azonban mutatja, hogy még ezek is felírhatók (24) alakban.

19.Feladat: Mutassuk meg, hogy az u -val való szorzás operátorához $f(u, v) = u\delta(u - v)$ tartozik.

Igazolás: Helyettesítsük $f(u, v) = u\delta(u - v)$ -t (24)-be és végezzük el az integrálást. \clubsuit

20.Feladat: Mutassuk meg, hogy az u szerinti deriválás operátorához $f(u, v) = \frac{\partial}{\partial u}\delta(u - v)$ tartozik.

Igazolás: Helyettesítsük $f(u, v) = \frac{\partial}{\partial u}\delta(u - v)$ -t (24)-be, emeljük ki az u -szerinti deriválást (ezt azért tehetjük meg, mert az integrálás v -re történik) és végezzük el az integrálást. \clubsuit

21.Feladat: Igazoljuk, hogy a 20.feladat képlete folytonos bázisban is igaz:
 $f(u, v) = (\vec{e}_u, \hat{f}\vec{e}_v)$.♣

Az operátorösszeadás és az operátorszorzás:

Legyen \hat{f} és \hat{g} két lineáris operátor. *Összegükön* azt az $\hat{f} + \hat{g}$ lineáris operátort értjük, amely \vec{a} -ra hatva az $\hat{f}\vec{a} + \hat{g}\vec{a}$ vektort adja eredményül: $(\hat{f} + \hat{g})\vec{a} = \hat{f}\vec{a} + \hat{g}\vec{a}$. Az $\hat{f}\hat{g}$ szorzat pedig az a lineáris operátor, amelynek a hatását \vec{a} -ra úgy kapjuk, hogy először kiszámítjuk a $\hat{g}\vec{a}$ vektort, majd erre hatunk \hat{f} -el: $\hat{f}\hat{g}\vec{a} = \hat{f}(\hat{g}\vec{a})$.

Az operátorösszezés kommutatív művelet ($\hat{f} + \hat{g} = \hat{g} + \hat{f}$), az operátorszorzás azonban általában nem: az $\hat{f}\hat{g}$ és a $\hat{g}\hat{f}$ hatása általában nem ugyanaz. Ez a tény a kvantumelméletben alapvető fontosságú.

A kommutátor fogalma: Az

$$[\hat{f}, \hat{g}] \equiv \hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} \quad (25)$$

operátort az \hat{f} és a \hat{g} *kommutátorának* nevezzük. Ha a kommutátor zérus (a nullával való szorzás operátora), akkor a két operátor *felcserélhető egymással*: a hatásuk nem változik meg, ha a sorrendjüket megváltoztatjuk.

22.Feladat: Mutassuk meg, hogy az operátorszorzás azonos a mátrixszorzás *sor* \times *oszlop* alakjával, azaz

$$(\hat{f}\hat{g})_{ij} = \sum_{k=1}^D f_{ik}g_{kj}.$$

Igazolás:

$$\begin{aligned} (\hat{f}\hat{g}\vec{a})_i &= \sum_{k=1}^D f_{ik}(\hat{g}\vec{a})_k = \sum_{k=1}^D \sum_{j=1}^D f_{ik}g_{kj}a_j = \\ &= \sum_{j=1}^D \left(\sum_{k=1}^D f_{ik}g_{kj} \right) a_j \equiv \sum_{j=1}^D (\hat{f}\hat{g})_{ij}a_j. \clubsuit \end{aligned}$$

23.Feladat: A $D = 2$ -ben a

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (26)$$

operátorokat *Pauli-mátrixoknak* nevezzük⁸. Számítsuk ki a négyzeteiket és a szorzataikat.

Megoldás:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1$$

⁸A Pauli-mátrixok jelölése standard, és bár lineáris operátorok, nem szokás kalapot tenni rájuk.

$$\begin{aligned}
\sigma_x \sigma_y &= i\sigma_z & \sigma_y \sigma_x &= -i\sigma_z \\
\sigma_y \sigma_z &= i\sigma_x & \sigma_z \sigma_y &= -i\sigma_x \\
\sigma_z \sigma_x &= i\sigma_y & \sigma_x \sigma_z &= -i\sigma_y. \clubsuit
\end{aligned}$$

24.Feladat: Határozzuk meg a Pauli-mátrixok kommutátorait

Megoldás:

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z \quad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x \quad [\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y. \clubsuit$$

25.Feladat: Határozzuk meg az u -val való szorzás és az u -szerinti deriválás (operátorának a) kommutátorát.

Megoldás: Ehhez a feladathoz nem célszerű a 21. és a 22. feladatban kapott mátrixalakot használni. Jobb közvetlenül a kommutátor fogalmából kiindulni:

$$\left[u, \frac{d}{du} \right] a(u) = u \frac{da(u)}{du} - \frac{d}{du}(ua(u)) = -a(u).$$

Mivel \vec{a} tetszőleges lehet, ezért

$$\left[u, \frac{d}{du} \right] = -1. \clubsuit \tag{27}$$

3.19. A hermitikus operátorok

Az \hat{f}^+ operátort az \hat{f} adjungáltjának nevezzük, ha minden \vec{a} , \vec{b} -re teljesül az

$$(\vec{a}, \hat{f}\vec{b}) = (\hat{f}^+\vec{a}, \vec{b}) \tag{28}$$

reláció. Ha tehát egy operátor hatását a skalárszorzaton belül át akarjuk hárítani az egyik tényezőről a másikra, az operátort adjungálni kell. Nyilván $(\hat{f}^+)^+ = \hat{f}$.

26.Feladat: Mutassuk meg, hogy $(\hat{f}\hat{g})^+ = \hat{g}^+\hat{f}^+$.

Igazolás: Legyen $\vec{c} = \hat{g}\vec{b}$. Akkor egyrészt

$$(\vec{a}, \hat{f}\hat{g}\vec{b}) = (\vec{a}, \hat{f}\vec{c}) = (\hat{f}^+\vec{a}, \vec{c}) = (\hat{f}^+\vec{a}, \hat{g}\vec{b}) = (\hat{g}^+\hat{f}^+\vec{a}, \vec{b}),$$

másrészt

$$(\vec{a}, \hat{f}\hat{g}\vec{b}) = ((\hat{f}\hat{g})^+\vec{a}, \vec{b}).$$

A két egyenlőség összehasonlításából következik az állítás. \clubsuit

27.Feladat: Mutassuk meg, hogy az i -vel való szorzás operátorának adjungáltja a $(-i)$ -vel való szorzás operátora. \clubsuit

A két feladat következménye, hogy

$$(i\hat{f})^+ = -i\hat{f}^+. \quad (29)$$

Hogyan lehet meghatározni egy adott operátor adjungáltját?

28.Feladat: Legyen adva \hat{f} az f_{ij} mátrixelemeivel. Mutassuk meg, hogy \hat{f}^+ mátrixelemeit az indexek felcserélésével és komplex konjugálás egyidejű elvégzésével kapjuk meg:

$$\left(\hat{f}^+\right)_{ij} = f_{ji}^*. \quad (30)$$

Igazolás: A 20.feladat képlete alapján

$$\left(\hat{f}^+\right)_{ij} = (\vec{e}_i, \hat{f}^+ \vec{e}_j) = (\hat{f} \vec{e}_i, \vec{e}_j) = (\vec{e}_j, \hat{f} \vec{e}_i)^* = f_{ji}^*$$

tehát egy operátor adjungáltjának a mátrixa az operátor *transzponált mátrixának a komplex konjugáltjával* egyenlő.

29.Feladat: Határozzuk meg a Pauli-mátrixok adjungáltját.

Megoldás: $\sigma_i^+ = \sigma_i$ ($i = x, y, z$) ♣

Az önadjungált operátor fogalma: Egy lineáris operátort akkor nevezünk *önadjungáltnak* (vagy *hermitikusnak*), ha az adjungáltjával azonos. Az önadjungáltság feltétele tehát diszkrét bázisban: $f_{ji}^* = f_{ij}$. Speciálisan $f_{ii}^* = f_{ii}$: egy önadjungált operátor mátrixának f_{ii} *diagonális elemei* valósak.

Az előző feladat mutatja, hogy a Pauli-mátrixok önadjungált operátorok a $D = 2$ komplex vektortérben.

30.Feladat: Folytonos bázisban az \hat{f} -t az $f(u, v)$ kétváltozós függvénnyel adjuk meg. Mutassuk meg, hogy $f^+(u, v) = f^*(v, u)$, tehát az önadjungáltság feltétele $f^*(v, u) = f(u, v)$ ♣.

31.Feladat: Mutassuk meg, hogy az u -val való szorzás operátora önadjungált.

Igazolás:

Erre az operátorra $f(u, v) = u\delta(u-v)$, ahonnan $f^*(v, u) = v\delta(v-u) = u\delta(u-v) = f(u, v)$ ♣.

32.Feladat: Mutassuk meg, hogy az u -szerinti deriválás operátorának adjungáltja önmaga -1 -szerese.

Igazolás:

Erre az operátorra $f(u, v) = \frac{\partial}{\partial u}\delta(u-v)$, ahonnan $f^*(v, u) = \frac{\partial}{\partial v}\delta(v-u) = -\frac{\partial}{\partial u}\delta(u-v) = -f(u, v)$ ♣.

33.Feladat: Mutassuk meg, hogy az u -szerinti deriválás $(-i)$ -szerese hermitikus operátor.

Igazolás: Jelöljük az u -szerinti deriválás operát \hat{d}_u -val. Az előző feladat szerint $\hat{d}_u^+ = -\hat{d}_u$, ezért (29) következtében $(-i\hat{d}_u)^+ = i\hat{d}_u^+ = -i\hat{d}_u$, tehát $-i\hat{d}_u$ valóban hermitikus.

Megjegyzés: A $i\hat{d}_u$ ugyanígy hermitikus, a kvantummechanikában azonban a $-i\hat{d}_u = \frac{1}{i}\hat{d}_u$ -t használják.♣

3.20. A hermitikus operátorok hatása a vektorokra

A hermitikus operátorok legfontosabb tulajdonságai véges D dimenziójú komplex vektorterekben az alábbi állításokban foglalhatók össze:

1) Minden \hat{f} hermitikus operátorhoz tartozik D kitüntetett irány. A kitüntetett irányokba mutató vektorokat az \hat{f} *sajátvektorainak* nevezzük.

2) Amikor \hat{f} valamelyik sajátvektorra hat az irányát nem változtatja meg, hanem mindegyiket egy rá jellemző *valós* számmal, az adott sajátvektorhoz tartozó *sajátértékekkel* szorozza meg: ha \vec{a} sajátvektor, akkor $\hat{f}\vec{a} = \alpha\vec{a}$. A sajátértékek összesége alkotja az \hat{f} operátor *spektrumát*.

3) A különböző sajátértékekhez tartozó sajátvektorok ortogonálisak egymásra.

4) Ha ν_α darab lineárisan független sajátvektorhoz ugyanaz az α sajátérték tartozik (vagyis az α sajátérték ν_α -szor elfajult), akkor ezek a sajátvektorok a D -dimenziós vektortér egy ν_α dimenziós S_α alterét feszítik ki⁹. Az S_α -ban fekvő összes vektor az \hat{f} operátor α sajátértékhez tartozó sajátvektora, amelyek közül végtelen sok különböző módon lehet kiválasztani ν_α ortogonálisat. Az S_α minden vektora ortogonális az összes α -tól különböző sajátértékhez tartozó sajátvektorra.

5) Álljon az $\vec{\eta}_i$ ortonormált bázis ($i = 1, 2, \dots, D$) az \hat{f} sajátvektoraiból. Az $\vec{\eta}_i$ -hez tartozó sajátérték legyen β_i . Az \hat{f} hatását egy tetszőleges \vec{a} vektorra a legegyszerűbben úgy tekinthetjük át, ha az \vec{a} -t kifejtjük az $\vec{\eta}_i$ -k szerint:

$$\begin{aligned}\hat{f}\vec{a} &= \hat{f}(a_1\vec{\eta}_1 + a_2\vec{\eta}_2 + \dots + a_D\vec{\eta}_D) = a_1\hat{f}\vec{\eta}_1 + a_2\hat{f}\vec{\eta}_2 + \dots + a_D\hat{f}\vec{\eta}_D = \\ &= a_1\beta_1\vec{\eta}_1 + a_2\beta_2\vec{\eta}_2 + \dots + a_D\beta_D\vec{\eta}_D.\end{aligned}$$

6) Ez a képlet mutatja, hogy két operátor akkor (és csakis akkor) felcserélhető, ha van közös sajátvektor rendszerük. Ha u.i. az $\vec{\eta}_i$ -k a \hat{g} -nek is sajátvektora (γ_i sajátértékekkel), akkor nyilván

$$\hat{g}\hat{f}\vec{a} = \hat{f}\hat{g}\vec{a} = a_1\beta_1\gamma_1\vec{\eta}_1 + a_2\beta_2\gamma_2\vec{\eta}_2 + \dots + a_D\beta_D\gamma_D\vec{\eta}_D.$$

Ezek a tulajdonságok a hermitikus operátorok hatására vonatkozó legfontosabb tények. Közülük néhányat nagyon egyszerű bebizonyítani. A sajátértékek valósságának a bizonyítása pl. a következőképpen történik:

⁹Például $\nu_\alpha = 2$ esetén egy síkot.

Legyen \vec{a} sajátvektor α sajátértékkel: $\hat{f}\vec{a} = \alpha\vec{a}$. Akkor egyrészt

$$(\vec{a}, \hat{f}\vec{a}) = (\vec{a}, \alpha\vec{a}) = \alpha(\vec{a}, \vec{a}),$$

másrészt, \hat{f} hermititása következtében

$$(\vec{a}, \hat{f}\vec{a}) = (\hat{f}\vec{a}, \vec{a}) = (\alpha\vec{a}, \vec{a}) = \alpha^*(\vec{a}, \vec{a}).$$

Az első egyenletből kivonjuk a másodikat:

$$0 = (\alpha - \alpha^*)(\vec{a}, \vec{a}),$$

ahonnan $\alpha = \alpha^*$ q.e.d.

Hasonlóan bizonyítható, hogy a különböző sajátértékekhez tartozó sajátvektorok ortogonálisak egymásra. Legyen \vec{a} és \vec{b} az \hat{f} hermitikus operátor két sajátvektora α , β sajátértékekkel, amelyek különbözők. Akkor egyrészt

$$(\vec{a}, \hat{f}\vec{b}) = (\vec{a}, \beta\vec{b}) = \beta(\vec{a}, \vec{b}),$$

másrészt, \hat{f} hermititása és α valósága következtében

$$(\vec{a}, \hat{f}\vec{b}) = (\hat{f}\vec{a}, \vec{b}) = (\alpha\vec{a}, \vec{b}) = \alpha(\vec{a}, \vec{b}).$$

Az első egyenletből kivonjuk a másodikat:

$$0 = (\beta - \alpha)(\vec{a}, \vec{b}),$$

ahonnan $\alpha \neq \beta$ következtében $(\vec{a}, \vec{b}) = 0$ q.e.d.

Ezzel a 2) - 5) állításokat beláttuk. Az 1)-t példán illusztráljuk.

D=2-ben a hermitikus operátorokat egy

$$\hat{f} = \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} \\ f_{21} & f_{22} \end{pmatrix}$$

mátrixszal adhatjuk meg, amelyekben a hermititás következtében az f_{11} , f_{22} diagonális elemek valósak és $f_{12} = f_{21}^*$.

Legyen \vec{a} (egyenlőre ismeretlen) sajátvektor és α a hozzá tartozó sajátérték:

$$\hat{f}\vec{a} = \alpha\vec{a}.$$

Ennek az u.n. *sajátértékegyenletnek* a komponenseken keresztül kifejezett alakja a következő:

$$\left. \begin{aligned} f_{11}a_1 + f_{12}a_2 &= \alpha a_1 \\ f_{21}a_1 + f_{22}a_2 &= \alpha a_2. \end{aligned} \right\} \quad (31)$$

Ez két egyenlet a három a_1 , a_2 , α ismeretlenre. Valójában azonban nem sajátvektort, hanem csak a sajátvektorok *irányát* keressük. Ez azt jelenti, hogy az \vec{a}

valamelyik komponensét, ami biztosan nem nulla, önkényesen választhatjuk. Ezért elég a két egyenlet.

Rendezzük át (31)-t az

$$\left. \begin{aligned} (f_{11} - \alpha)a_1 + f_{12}a_2 &= 0 \\ f_{21}a_1 + (f_{22} - \alpha)a_2 &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (32)$$

alakba, ami *homogén* lineáris egyenletrendszer az a_1 , a_2 ismeretlen komponensekre.

Ha ez két lineárisan *független* egyenlet (vagyis a determinánsa nem nulla), akkor csak nulla megoldása van ($a_1 = a_2 = 0$)¹⁰. Ezért annak feltétele, hogy *legyen* sajátvektor az, hogy a (32) egyenlet determinánsa tűnjön el:

$$\begin{vmatrix} f_{11} - \alpha & f_{12} \\ f_{21} & f_{22} - \alpha \end{vmatrix} = \alpha^2 - (f_{11} + f_{22})\alpha + (f_{11}f_{22} - f_{12}f_{21}) = 0. \quad (33)$$

Ez az egyenlet másodfokú algebrai egyenlet az α sajátértékre. Két megoldása van, amelyek — speciális esetként — lehetnek egyenlők egymással. Az \hat{f} hermititása következtében a megoldások valósak (diskrimináns $= (f_{11} - f_{22})^2 + 4|f_{12}|^2 \geq 0$ valós).

Ha a két megoldásként kapott sajátérték bármelyikét visszahelyettesítjük (32)-ba, két olyan egyenletet kapunk az a_1 , a_2 ismeretlenekre, amelyek nem lineárisan függetlenek egymástól: az egyik egyenlet következménye a másiknak. Ezért csak a_1 és a_2 *arányát* tudjuk kiszámítani és ezt a két egyenlet bármelyike alapján megtehetjük. Többre nincs is szükség, hiszen csak a sajátértékekhez tartozó irányokat keressük. A sajátvektorokat magukat olyan hosszúnak választhatjuk, amilyennek akarjuk (általában 1-re normáljuk őket).

Mielőtt feladatokat nézünk, egy kicsit más módon is összefoglaljuk a fejezet fő állításait. Ezek lényege az, hogy nagyon szoros kapcsolat van egyrészt a hermitikus operátorok, másrészt az ortonormált (deltára normált) bázisok között. Szimbólikusan:

$$\begin{aligned} \text{hermitikus operátor} &\implies \text{bázis} \\ \text{bázis} &\implies \text{egymással kommutáló hermitikus operátorok} \end{aligned}$$

Egyrészt, egy operátor meghatározza¹¹ azt a bázist, amelynek bázisvektorai az operátor sajátvektorai. Másrészt, ha adva van egy ortonormált bázis, ez kiválasztja hermitikus operátorok közül azokat (végtelen sokat), amelyeknek a sajátvektorai megegyeznek az adott bázis bázisvektoraival, és csak az egyes bázisvektorokhoz tartozó sajátértékekben különböznek egymástól.

Ha kiválasztunk két operátort, ezzel teljesen meghatározzuk a hozzájuk tartozó bázisok *kölcsönös* viszonyát. A kvantummechanikai feladatok leggyakoribb problémája a különféle operátorokhoz tartozó bázisok *relatív helyzetének* megállapítása.

¹⁰Erről könnyen meggyőződhetünk, ha a szokásos módszerrel megpróbáljuk az a_1 vagy az a_2 komponensét kiejteni.

¹¹Az elfajulástól az egyszerűség kedvéért eltekintünk.

34.Feladat: $D = 2$ -ben legyenek adva az

$$\hat{f} = \begin{pmatrix} -1/2 & 3/2 \\ 3/2 & -1/2 \end{pmatrix} \quad \hat{g} = \begin{pmatrix} 7/5 & 2/5 \\ 2/5 & 9/5 \end{pmatrix}$$

hermitikus operátorok. Vizsgáljuk a hozzájuk tartozó bázisok relatív helyzetét.

Megoldás: Legyen \vec{a} az \hat{f} α -sajátértékhez tartozó sajátvektora:

$$\hat{f}\vec{a} = \alpha\vec{a},$$

$$\begin{pmatrix} -1/2 & 3/2 \\ 3/2 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix},$$

$$\left. \begin{aligned} (-1/2 - \alpha)a_1 + 3/2 \cdot a_2 &= 0 \\ 3/2 \cdot a_1 + (-1/2 - \alpha)a_2 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (34)$$

A homogén egyenletrendszernek csak akkor van megoldása, ha a két egyenlet lineárisan összefügg egymással, vagyis ha az egyenletrendszer determinánsa zérus:

$$\begin{vmatrix} (-1/2 - \alpha) & 3/2 \\ 3/2 & (-1/2 - \alpha) \end{vmatrix} = 0,$$

$$(-1/2 - \alpha)^2 - 9/4 = 0.$$

Két megoldás van:

$$\alpha_1 = 1, \quad \alpha_2 = -2.$$

Az α_1 -hez tartozó normált \vec{a} legyen az \vec{e}_1 bázisvektor, az α_2 -höz tartozó normált \vec{a} pedig az \vec{e}_2 bázisvektor. Ezek vetületeit úgy találjuk meg, hogy (34)-ben α -t először α_1 -el, majd α_2 -vel helyettesítjük és a két esetben kapott $\vec{a} = (a_1, a_2)$ -t 1-re normáljuk.

A sajátértékeket abból a feltételből határoztuk meg, hogy (34) két egyenlete legyen egyenértékű (a baloldalak legyenek arányosak egymással), ezért (34) valójában csak egy egyenlet (amely lehet akár a felső, akár az alsó). Helyettesítsük $\alpha = \alpha_1 = 1$ -t mondjuk a felsőbe:

$$(-1/2 - 1)a_1 + 3/2 \cdot a_2 = 0,$$

$$a_1 = a_2.$$

Az \vec{e}_1 két komponense tehát egyenlő egymással, és a vektor akkor lesz 1-re normált, ha ezek a komponensek $1/\sqrt{2}$ -vel egyenlők:

$$\vec{e}_1 = (1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}).$$

(Megjegyezzük, hogy a választás nem egyértelmű, a két komponens lehetne $-1/\sqrt{2}$ is. A választás egyetlen szempontja az egyszerűség.)

Ha $\alpha = \alpha_2 = -2$ -t helyettesítjük (34)-felső egyenletébe, a

$$(-1/2 + 2)a_1 + 3/2 \cdot a_2 = 0$$

egyenletet kapjuk, amelyből $a_1 = -a_2$, ezért

$$\vec{e}_2 = (1/\sqrt{2}, -1/\sqrt{2}).$$

Megállapíthatjuk tehát, hogy az \hat{f} -hez rendelt ortonormált bázist az \vec{e}_1, \vec{e}_2 vektorok feszítik ki, amelyekhez az $\alpha_1 = 1, \alpha_2 = -2$ sajátértékek tartoznak.

Hasonló gondolatmenettel azt találjuk, hogy a \hat{g} normált sajátvektorai és a hozzájuk tartozó sajátértékek a következők:

$$\begin{aligned} \vec{\eta}_1 &= (1/\sqrt{5}, 2/\sqrt{5}) & \vec{\eta}_2 &= (2/\sqrt{5}, -1/\sqrt{5}) \\ \beta_1 &= 2 & \beta_2 &= 1. \end{aligned}$$

Az $\vec{\eta}_1$ és az \vec{e}_1 közötti szög legyen φ :

$$\cos \varphi = (\vec{\eta}_1, \vec{e}_1) = \frac{1}{\sqrt{5}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{2}{\sqrt{5}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{3}{\sqrt{10}} = 0.95,$$

ezért $\varphi \approx 20^\circ$.

35.Feladat: Határozzuk meg a (26) Pauli-mátrixok sajátértékeit és normált sajátvektorait.

Megoldás: Mindhárom Pauli-mátrix két sajátértéke $+1$ és -1 :

$$\sigma_x \vec{u}_\pm = \pm \vec{u}_\pm \quad \sigma_y \vec{v}_\pm = \pm \vec{v}_\pm \quad \sigma_z \vec{w}_\pm = \pm \vec{w}_\pm$$

$$\begin{aligned} \vec{u}_+ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right) & \vec{u}_- &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \\ \vec{v}_+ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{i}{\sqrt{2}} \right) & \vec{v}_- &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{i}{\sqrt{2}} \right) \\ \vec{w}_+ &= (1, 0) & \vec{w}_- &= (0, 1). \end{aligned}$$

A hermitikus operátorok és a bázisok kölcsönös kapcsolata lehetővé teszi, hogy a bázisvektorokat a fizikai jelentés nélküli sorszám helyett sajátértékekkel indexeljük: ha a bázis elemei az \hat{f} operátor (normált) sajátvektorai, akkor az \hat{f} sajátértékei tölthetik be az index szerepét. Ebben a feladatban már ezt az indexelési módot alkalmaztuk. ♣

36.Feladat: Legyen adva $D=3$ -nál az

$$\hat{f} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 4 \\ 0 & 6 & 0 \\ 4 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

operátor. Határozzuk meg a sajátértékeit és a sajátvektorait.

Megoldás:

$$\alpha_1 = -2, \quad \alpha_2 = \alpha_3 = 6.$$

$$\vec{\eta}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad \vec{\eta}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad \vec{\eta}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

A 6-os sajátérték elfajult, $\nu_6 = 2$. Az $\vec{\eta}_2$ és az $\vec{\eta}_3$ egy S_6 síkot feszít ki, amelyben minden olyan vektorpár, amely $\vec{\eta}_2$ és $\vec{\eta}_3$ valamilyen ϑ szöggel történő elforgatásával kapható, szintén ortonormált sajátvektor-párt alkot:

$$\begin{aligned} \vec{\eta}_2' &= \cos \vartheta \cdot \vec{\eta}_2 + \sin \vartheta \cdot \vec{\eta}_3 \\ \vec{\eta}_3' &= -\sin \vartheta \cdot \vec{\eta}_2 + \cos \vartheta \cdot \vec{\eta}_3. \end{aligned}$$

Nyilván $(\vec{\eta}_2', \vec{\eta}_2') = (\vec{\eta}_3', \vec{\eta}_3') = 1$, $(\vec{\eta}_2', \vec{\eta}_3') = 0$ tetszőleges ϑ -nál ♣.

A hermitikus operátorok véges D-beli tulajdonságai a Hilbert-térben is érvényesek azzal a kiegészítéssel, hogy általános esetben egy adott hermitikus operátor sajátvektoraiban részben lehetnek diszkrét, részben folytonosak. A sajátérték-spektrum ennek megfelelően egy diszkrét és egy folytonos részre bomlik. A folytonos spektrumhoz tartozó sajátvektorok δ -függvényre normálhatók.

A két legalapvetőbb \mathcal{H} -beli hermitikus operátor a folytonos változóval való szorzás és a folytonos változó szerinti deriválás operátora (ez utóbbi $(-i)$ -vel szorozva). Tárgyalásukat azonban későbbre halasztjuk, amikor már meg tudjuk jelölni a helyüket a kvantumelmélet matematikai apparátusán belül. Ezért a matematikai előkészítést most megszakítjuk és áttérünk a kvantummechanika alapelveinek a tárgyalására.

3.21. Az x -tengely mentén mozgó tömegpont állapotvektora

Klasszikus mechanikai állapoton a Mechanika-jegyzet 1.30 fejezete szerint a koordináták és az impulzusok összeségét értjük (egy adott pillanatban). Speciálisan 1 szabadsági foknál ($f = 1$), amikor a mozgás az x -tengely mentén történik, az állapotot az x és a p értéke határozza meg.

A *kvantummechanikai állapot* fogalma ennél összehasonlíthatatlanul absztraktabb: az x -tengely mentén mozgó tömegpont állapotát a *Hilbert-tér normált vektorai határozzák meg*. Ebben az összefüggésben a Hilbert-teret célszerű \mathcal{H}_x -el jelölni, utalva rá, hogy az x -tengely mentén mozgó tömegpont Hilbert-teréről van szó.

Egy $\vec{\psi} \in \mathcal{H}_x$ vektor csak akkor lehet állapotvektor (csak akkor tartozik hozzá fizikai állapot), ha normálható. A különböző normálható vektorok különböző fizikai állapotokat határoznak meg. Kivétel az az eset, amikor csupán *fázisfaktorban* ($e^{i\kappa}$ alakú egységnyi abszolút értékű komplex szorzóban) különböznek — ekkor mindketten ugyanazt az állapotot reprezentálják¹².

A Bohr-Sommerfeld modellben az állapotok a kvantumfeltételek által kiválasztott klasszikus mozgások voltak. A kvantummechanikában erről szó sem lehet — a Hilbert-tér normálható vektorai által meghatározott állapotokhoz semmiféle megszokott értelemben vett mozgás sem rendelhető. Egy szempontból azonban a Bohr-Sommerfeld modell valamint a kvantummechanika állapot-fogalmi között van egy mély kapcsolat: mint látni fogjuk, a kvantummechanika állapotai között vannak olyanok, amelyeket *ugyanazok a kvantumszámok* jellemeznek, mint a Bohr-Sommerfeld modell kiválasztott pályáit.

Így pl. a lineáris harmonikus oszcillátor kvantumállapotait a $\vec{\psi}_n$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) állapotvektorok, a hidrogénatom elektronjának kvantumállapotait pedig a $\vec{\psi}_{nlm}$ ($n = 1, 2, 3, \dots$, $l = 0, 1, 2, \dots$, $-l \leq m \leq l$) állapotvektorok jellemzik (ez utóbbiak nem a \mathcal{H}_x , hanem a három dimenziós mozgásokhoz tartozó \mathcal{H}_{xyz} Hilbert-tér vektorai).

A kvantummechanika és a Bohr-Sommerfeld modell állapot-fogalma között van még egy egészen alapvető különbség, ami abból következik, hogy egy vektortér két vektorának bármely lineárkombinációja is vektor. Mivel a Hilbert-tér is vektortér, amelynek (normálható) vektorait a fizikai állapotokkal hoztuk kapcsolatba, ezért a kvantummechanikában érvényes az *állapotok szuperpozíciójának elve*: két kvantumállapot (állapotvektorainak) tetszőleges lineárkombinációja is egy lehetséges fizikai állapot (állapotvektora). A Bohr-Sommerfeld modellben ilyesmiről természetesen szó sem lehet, hiszen két klasszikus mozgás (trajektória) lineárkombinációja nem egy lehetséges mozgás (trajektóriája); a newtoni mechanika mozgásegyenletei nemlineárisak, a szuperpozíció elve nem érvényes rájuk.

A kvantummechanikai szuperpozíció elv következtében a lineáris harmonikus oszcillátor — mondjuk — $\vec{\psi}_1$ és $\vec{\psi}_2$ állapota mellett létezik az $\alpha\vec{\psi}_1 + \beta\vec{\psi}_2$ állapot is, amely fizikailag mind $\vec{\psi}_1$ -től mind $\vec{\psi}_2$ -től különbözik. A hidrogénatomnál pedig lehetségesek például az olyan $\vec{\psi}_{nlm}$ állapotvektorok lineárkombinációi, amelyek csak az m kvantumszámban különböznek egymástól.

Ez a lehetőség oldja meg a térbeli kvantálás problémáját (11.fejezet), amely a kvantummechanikában nem lép fel. Ebben az elméletben ugyanis nem igaz az, hogy az impulzusmomentum z -tengelyre vetett vetülete *minden* lehetséges állapotban $\hbar m$, ahol az m egész szám. Mint látni fogjuk, a különböző m -jú $\vec{\psi}_{nlm}$ -ekből képzett lineárkombinációk olyan állapotot határoznak meg, amelyben az impulzusmomentum z -komponense a \hbar -nak nem egész számú többszöröse.

¹²Az indoklást a *Mérési posztulátumok* c. fejezetben adjuk meg.

3.22. A fizikai mennyiségek mint operátorok

De hogyan lehet kiválasztani \mathcal{H}_x vektorai közül azokat, amelyek különböző előre meghatározott fizikai tulajdonságokkal rendelkező objektum kvantumállapotai?

A fizikai állapotok és az őket reprezentáló állapotvektorok kapcsolatának a megállapítását azzal kezdjük, hogy összefüggést teremtünk a mozgó tömegpont fizikai tulajdonságai és \mathcal{H}_x vektorai között.

1. Állítás: A tömegpontot jellemző fizikai mennyiségeknek hermitikus operátorok feleltethetők meg, amelyek \mathcal{H}_x vektoraira hatnak.

Pontosítsuk az állítást. Fizikai mennyiségen az olyan dinamikai mennyiségeket értjük, mint pl. az energia, impulzusnyomaték, amelyek a koordináták és az impulzusok (sebességek) függvényei, és a mozgás során változtathatják az értéküket. A konstans paramétereket (tömeg, töltés) nem soroljuk a fizikai mennyiségek közé.

2. Állítás: Egy fizikai mennyiség operátorát úgy kapjuk meg, hogy a szóbanforgó mennyiség klasszikus mechanikai képletében a koordinátákat és az impulzusokat operátorokkal helyettesítjük.

Elegendő tehát ismernünk a koordináták és az impulzusok operátorait, az x -tengely menti mozgásoknál az \hat{x} és a \hat{p} operátort. Ha ezeket ismerjük, akkor pl. a lineáris harmonikus oszcillátor energiájának operátorát (az u.n. \hat{H} *Hamilton-operátort*) az $\left(\frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{D}{2}\hat{x}^2\right)$ formula adja meg. Az \hat{x} és a \hat{p} operátorok konkrét matematikai alakját a *Heisenberg-féle vagy kanonikus felcserélési relációkból* olvashatjuk ki, amelyek a kvantummechanika alapvető posztulátumai. Speciálisan $f = 1$ -nél egyetlen felcserélési relációról van szó, amely a következő:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (35)$$

A (27)-ből világos, hogy ha \hat{x} -t az x -el való szorzás operátorának, \hat{p} -t pedig $\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ -nek választjuk (ezek — mint láttuk, — hermitikus operátorok), akkor (35) teljesül. Matematikai tétel (a Neumann-Stone tétel) garantálja, hogy a fizikai következmények szempontjából minden más választás ezzel ekvivalens.

A következő fejezetben megvizsgáljuk az \hat{x} és a \hat{p} operátorok tulajdonságait, most azonban folytassuk a fizikai tulajdonságok és az állapotvektorok kapcsolatának az elemzését. Vegyünk egy tetszőleges fizikai mennyiséget (jelöljük \mathcal{A} -val), amelyhez az \hat{A} operátor tartozik (ilyen volt pl. a lineáris harmonikus oszcillátor energiája). Érvényes a további két állítás:

3. Állítás: Az \mathcal{A} fizikai mennyiség lehetséges értékei az \hat{A} operátor sajátértékeivel (az \hat{A} spektrumával) egyeznek meg.

4. Állítás: Amikor az \mathcal{A} értéke α -val egyenlő (amely \hat{A} valamelyik sajátértéke), a tömegpont állapotvektora az \hat{A} operátor α sajátértékhez tartozó (normált) sajátvektorával egyezik meg.

Legyen $\vec{\psi}$ tetszőleges (normált) állapotvektor. Mi lesz a mérés eredménye (kimenetele), ha a $\vec{\psi}$ állapotvektorú rendszeren megmérjük az \mathcal{A} fizikai mennyiséget?

A 3. állítás szerint az \hat{A} operátor valamelyik sajátértékét kapjuk eredményül. A kvantummechanika csak azt mondja meg, hogy az egyes sajátértékeket *milyen valószínűséggel* kapjuk mérési eredményként. A valószínűség kiszámítására vonatkozik az utolsó állítás:

5. Állítás: Mint később részletesebben kifejtjük, ha az \mathcal{A} mennyiséget egy $\vec{\psi}$ állapotvektorú rendszeren megmérjük, az α sajátértéket

$$W_\alpha = |(\vec{\varphi}_\alpha, \vec{\psi})|^2$$

valószínűséggel kapjuk meg a mérés során. A képletben $\vec{\varphi}_\alpha$ az \hat{A} operátor α sajátértékhez tartozó (normált) sajátvektora.

A felsorolt öt állítás az \hat{x} és a \hat{p} matematikai alakjának az ismeretében $f = 1$ -nél lehetővé teszi az állapotvektor megtalálását egy fizikai mennyiség értékének az alapján, valamint az ismert állapotú rendszeren végezhető mérések eredményének a kiszámítását.

Hogyan lehetett erre rájönni?

Rendkívüli intuíció kellett hozzá, ami azóta is megérdemelt csodálat tárgya.

Az új mechanikát egymástól eltérő gondolatmenetek alapján találta meg (24 éves korában) W. Heisenberg (1925) és — L. de Broglie elképzelését (1923) követve — E. Schrödinger (1926). A két módon kapott elmélet első látásra gyökeresen különbözött egymástól, de Schrödinger megmutatta, hogy ugyanannak a fizikai elméletnek két különböző matematikai megfogalmazásáról van szó. De Broglie és Schrödinger alapgondolatát a tárgyalásunk egy későbbi pontján ismertetjük. Most Heisenberg gondolatmenetét próbáljuk meg vázolni.

Heisenberg sokkal súlyosabbnak érezte a Bohr-Sommerfeld modell és a spektrális hasonlóság elve közötti ellentmondást, mint kvantumelmélettel foglalkozó kollégái. Úgy gondolta, hogy ha az elektron valóban a Bohr-Sommerfeld kvantumfeltételek által kijelölt pályán mozogna, semmiképpen sem sugározhatna olyan frekvencián, ami a mozgási frekvenciának (ω_n -nek) nem felharmónikus. Márpedig a Bohr-Sommerfeld modell szerint a hidrogénatom elektronjával pontosan ez történik. Ebből Heisenberg azt a radikális következtetést vonta le, hogy *téves* a Bohr-Sommerfeld modellnek az az elképzelése, amely szerint a kvantumállapotok speciális kvantumfeltételek által kiválasztott klasszikus *pályákkal*¹³ azonosíthatók. Úgy látta, hogy az ellentmondás a spektrális hasonlóság elvével csak azon az áron szüntethető meg, ha az elektron valószínűségi atombeli viselkedése a mechanikai mozgás minden korábbi elképzelésétől gyökeresen különbözik, és ennek következtében semmilyen korábbi állítás, így a spektrális hasonlóság elve sem vonatkoztatható rá.

¹³Pontosabb volna trajektóriát mondanunk, de megmaradunk a rövidebb „pálya” kifejezésnél.

A Heisenberg előtt álló kérdés tehát a következő volt: hogyan lehetne az elektron atombeli kvantumállapotának a fogalmát tartalmas módon fenntartani anélkül, hogy azt a mechanikai mozgás bármiféle ismert formájához kapcsolnánk?

Az egyedüli biztos dolog, amit az atomról tudunk — vélte Heisenberg —, a kisugárzott fény spektruma. A Maxwell-elektrodinamika szerint a dipólsugárzás spektrumát a sugárzó rendszer $\vec{p}(t)$ dipólnyomaték vektorának a második időbeli deriváltja határozza meg. Periódikus mozgásnál (Elektrodinamika jegyzet 39. fejezet) a $\vec{p}(t)$ Fourier-sorba fejthető az ω alapfrekvencia felharmónikusai szerint:

$$\vec{p}(t) = \vec{p}_0 + \vec{p}_1 \cdot \cos \omega t + \vec{p}_2 \cdot \cos 2\omega t + \dots$$

(v.ö. ay Elektrodinamika jegyzet (177) képletével). Vegyük ennek az egyenletnek az x -vetületét. Mivel $\vec{p} = e\vec{r}$, ezt kapjuk:

$$x(t) = x_0 + x_1 \cdot \cos \omega t + x_2 \cdot \cos 2\omega t + \dots$$

Az x_m ($m = 0, 1, 2, \dots$) az m -ik felharmónikus amplitúdója az elektron periódikusan változó helykoordinátájának x -komponensében.

Ha a mozgás az n -ik Bohr-pályán történik, akkor ezt célszerű a képletben explicite feltüntetni:

$$x(t; n) = x_0(n) + x_1(n) \cdot \cos \omega_n t + x_2(n) \cdot \cos 2\omega_n t + \dots$$

Az $x_m(n)$ amplitúdóban az n index az n -ik kvantumállapotra, az m pedig az elektron n -indexű pályán történő mozgásában az m -ik felharmónikusra utal. De az elektronpályáktól meg akarunk szabadulni, a kvantumállapot fogalmát Bohr-pálya *nélkül* akarjuk fenntartani! Van-e mód arra, hogy ezt az m indexet kvantumállapotot jelölő kvantumszámmal helyettesítsük?

A korrespondencia limeszben — mint láttuk —, ez lehetséges, ugyanis az m -ik felharmónikus az $n \rightarrow n - m = n'$ átmenetben sugárzódik ki. Ezért ebben a limeszben $x_m(n)$ -t átjelölhetjük $x_{nn'}$ -re, amelyben már csak kvantumállapotokra utaló kvantumszámok fordulnak elő.

Már Bohr észrevette, hogy a Maxwell-elmélet dipólsugárzásra vonatkozó

$$P = \frac{1}{12\pi\epsilon_0 c^3} \sum_{m=1}^{\infty} (m\omega)^4 p_m^2$$

formulája (Elektrodinamika jegyzet (180) képlet) a tapasztalat szerint a korrespondencia-limeszben az atom $n \rightarrow n'$ átmenetben történő sugárzásra is érvényes, ha benne $m\omega$ helyébe az $\omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar}$ körfrekvenciát helyettesítjük, p_m -t pedig az n -kvantumszámú pályán történő mozgásból számítjuk ki. A korrespondencia-elv alapján ez várható is volt. A korrespondencia-limeszen kívül azonban ez az eljárás nem adott a tapasztalattal egyező sugárzási intenzitásokat.

Heisenberg — ennek ellenére — az így kapható formulát érvényesnek fogadta el *tetszőleges* $n \rightarrow n'$ átmenetnél, de azzal a módosítással, hogy p_m -t nem hozta összefüggésbe a Bohr-pályával, hanem $ex_{nn'}$ -vel helyettesítette. Ez a lépés azzal indokolható, hogy a így kapott képletben már csak az állapotok kvantumszámái fordulnak elő, nincs benne utalás elektronpályákra.

De hogyan lehet $x_{nn'}$ -t elektronpályák nélkül kiszámítani? Csak egy módon: *ha a Newton-egyenleteket olyan új mozgásegyenletekkel helyettesítjük, amelyek a pályát meghatározó $x(t)$, $y(t)$, $z(t)$ függvények helyett magukat az $x_{nn'}$ -ket (és a hasonló jellegű $y_{nn'}$, $z_{nn'}$ koefficienseket) tartalmazzák ismeretlenként.*

Ez az a lépés, ami teljesen új mechanikai elméletbe vezet át és értelmet ad az eddigi átalakításoknak. Heisenberg sikeresen oldotta meg ezt a feladatot, a korrespondencia-elv gondos analízise alapján képes volt felírni az új mozgásegyenleteket, amelyek ma az ő nevét viselik¹⁴.

Miközben mindezt végiggondolta, Heisenbergnek nem volt tudomása arról, hogy léteznek mátrixok. Ezért azt sem tudhatta, hogy az $x_{nn'}$ számok, amelyeket bevezetett és alaptulajdonságaikat is felderítette, egy \hat{x} mátrix elemei, és új mozgásegyenletei az $\hat{x}(t)$ mátrixra vonatkozó mátrixegyenletek. Erre idősebb kollégája, Max Born hívta fel a figyelmét. Később világossá vált — nem utolsó sorban Neumann János munkássága nyomán —, hogy az \hat{x} mátrix a Hilbert-tér operátoraként is felfogható, és nagyon hamar, már a húszas évek végére kialakult a kvantummechanika mai formája.

A Bohr-Sommerfeld modellben az elektron mozgása az elsődleges, a mechanikai mozgások közül választjuk ki azokat, amelyek meghatározzák a lehetséges kvantumállapotokat. Heisenberg törekvésének a lényege az volt, hogy ezt a viszonyt megfordítsa: a kvantumállapot fogalmát tekintette alapvetőnek, a kvantumállapotok összessége az, ami — feltevése szerint —, az elektron viselkedését meghatározza. Ezért kezdtük mi is a kvantummechanika tárgyalását az állapot fogalmával. Heisenberg várakozásával összhangban az új mechanika szerint az elektron viselkedése egyáltalán nem fogható fel mechanikai mozgásként (ezért válik lényegtelenné a spektrális hasonlóság elve), és csak a korrespondencia-limeszben kezd a mozgásra hasonlítani.

3.23. Az \hat{x} és a \hat{p} operátor \mathcal{H}_x -ben

Mint már szó volt róla, ha \hat{x} -nek az x -el való szorzás operátorát, \hat{p} -nek pedig az x -szerinti deriválás \hbar/i -szeresét választjuk, akkor a (35) kanonikus cserereláció teljesül. Valóban, legyen a $\vec{\psi}$ a \mathcal{H}_x tetszőleges vektora, amelynek komponenseit a $\psi(x)$ függvény adja meg (a \mathcal{H}_x -ben a folytonos komponens meghatározó függvényargumentumot, amelyet korábban u -val vagy v -vel jelöltünk, többnyire célszerű x -el jelölni). Akkor

$$\left[x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right] \psi = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{d\psi}{dx} - \frac{d}{dx}(x\psi) \right) = -\frac{\hbar}{i} \psi = i\hbar\psi.$$

¹⁴Mi ennek az egyenletnek a Schrödinger által felfedezett alakját fogjuk használni.

Láttuk (31. és 33. feladat), hogy ez a két operátor hermitikus. Keressük meg a sajátfüggvényeiket és a sajátértékeiket.

Jelöljük az \hat{x} operátor valamelyik sajátértékét a -val, a hozzá tartozó sajátvektort pedig \vec{e}_a -val (Dirac-jelölésben $\vec{e}_a \equiv |a\rangle$ vagy pontosabban $|x = a\rangle$). Ennek a sajátvektornak a komponensei az $e_a(x)$ függvény értékei a különböző x -eknél. Annak feltétele, hogy ez valóban az a sajátértékhez tartozó sajátvektor legyen, nyilván az

$$\hat{x}\vec{e}_a = a\vec{e}_a. \quad (36)$$

sajátértékegyenlet teljesülése, amely a komponensek nyelvén a következő:

$$x \cdot e_a(x) = a \cdot e_a(x). \quad (37)$$

Elég nyilvánvaló, hogy az ilyen tulajdonságú függvény nem lehet más, mint a $\delta(x - a)$ konstansszorososa:

$$e_a(x) = N \cdot \delta(x - a). \quad (38)$$

Valóban, a $\delta(x - a)$ alaptulajdonságából következik, hogy ha megszorozzuk egy $f(x)$ függvénnyel, akkor $f(x)$ -ben az x -t helyettesíthetjük a -val, hiszen $x \neq a$ -nál $\delta(x - a)$ úgyis zérus. Ha ezt az észrevételt az $f(x) = x$ -re alkalmazzuk, akkor éppen a (37) egyenletre jutunk.

Ebben a gondolatmenetben semmiféle kikötést sem kell tennünk a értékére, ezért az \hat{x} operátor spektruma folytonos az egész $(-\infty, \infty)$ intervallumban. A különböző sajátértékekhez tartozó sajátvektorok ortogonálisak egymásra, és ha $N = 1$ -t választunk, deltára normáltak:

$$(\vec{e}_a, \vec{e}_b) = \int dx e_a(x)^* e_b(x) = \int dx \delta(x - a)\delta(x - b) = \delta(b - a).$$

A (38) és a (21) összevetése mutatja, hogy az $e_a(x)$ függvények deltára normált bázist határoznak meg \mathcal{H}_x -ben. Fejtsük ki $\vec{\psi}$ vektorát ennek a bázisnak az elemei szerint¹⁵:

$$\vec{\psi} = \int dx \cdot \psi(x) \vec{e}_x. \quad (39)$$

Az $\hat{x}\vec{\psi}$ vektor komponensei az $x\psi(x)$ függvények. Ez így látható:

$$\hat{x}\vec{\psi} = \hat{x} \int dx \cdot \psi(x) \vec{e}_x = (\hat{x} \text{ lineáris}) = \int dx \cdot \psi(x) \hat{x} \vec{e}_x \stackrel{(36)}{=} \int dx \cdot \psi(x) x \vec{e}_x,$$

¹⁵A fejezet eddigi képleteiben az \hat{x} operátor sajátvektorait megkülönböztető indexet (sajátértéket) a -val, a komponenseket megkülönböztető függvényargumentumot pedig x -el jelöltük. A továbbiakban azonban az a helyett is gyakran x -t írunk. Ez természetesen megengedett, hiszen a jelölésre használt betű önkényesen választható. Csak azt kell észben tartani, hogy az indexben álló mennyiség a sajátvektorokat, a zárójelben álló függvényargumentum pedig az egyes sajátvektorok (folytonos) komponenseit különbözteti meg egymástól.

ahonnan a (39)-el való összehasonlítás alapján leolvasható, hogy $\hat{x}\vec{\psi}$ hullámfüggvénye valóban $x\psi(x)$ -el egyenlő.

Amikor a Hilbert-tér vektorait az \hat{x} sajátvektoraiból álló bázisra vonatkoztatjuk (vagyis a $\vec{\psi}$ -ket a $\psi(x)$ függvényekkel adjuk meg), akkor azt mondjuk, hogy *koordinátareprezentációban* dolgozunk. A $\psi(x)$ függvényt a $\vec{\psi}$ (koordinátareprezentáció-beli) *hullámfüggvényének*, a sajátvektorok hullámfüggvényeit pedig *sajátfüggvényeknek* nevezzük. Így pl. $e_a(x)$ az \hat{x} operátor a sajátértékhez tartozó sajátfüggvénye. Utolsó egyenletünk tartalma pedig így fogalmazható: koordinátareprezentációban az \hat{x} operátor hatása az, hogy a hullámfüggvényt x -el szorozza.

Koordinátareprezentációban a \hat{p} operátor hatása az, hogy — mint már láttuk, — a hullámfüggvény *deriváltját* \hbar/i -vel szorozza:

$$\hat{p}\vec{\psi} = \int dx \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi(x)}{dx} \vec{e}_x.$$

Kérdés: mik a \hat{p} operátor sajátértékei és sajátvektorai?

Jelöljük a sajátértéket p -vel, a hozzá tartozó sajátvektort pedig \vec{e}_p -vel ($\vec{e}_p \equiv |p\rangle$). A sajátértékegyenlet

$$\hat{p}\vec{e}_p = p\vec{e}_p,$$

amely koordinátareprezentációban a következő:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{de_p(x)}{dx} = pe_p(x).$$

Behelyettesítéssel ellenőrizhető, hogy az egyenlet megoldása

$$e_p(x) = N \cdot e^{\frac{i}{\hbar}px},$$

amely akkor lesz deltára normált, ha a szabadon választható N normálási tényező értéke $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$:

$$e_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}. \quad (40)$$

A deltára való normáltság igazolása:

$$\begin{aligned} (\vec{e}_{p'}, \vec{e}_p) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e_{p'}^*(x) e_p(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x} dx = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')x'} dx' = \delta(p-p'). \end{aligned} \quad (41)$$

Az utolsó előtti lépésben bevezettük az $x' = x/\hbar$ új integrációs változót, az utolsó egyenlőséget pedig a fejezet függelékében igazoljuk. A gondolatmenetben a p értékét semmi sem korlátozza. ezért a \hat{p} spektruma is a teljes $(-\infty, \infty)$ számegegyenes.

Foglaljuk össze megegyszer a hely és az impulzus operátoraira vonatkozó képleteket:

$$\hat{x}\vec{e}_x = x\vec{e}_x \quad (\vec{e}_x, \vec{e}_{x'}) = \delta(x - x') \quad (-\infty < x, x' < \infty) \quad (42)$$

$$\hat{p}\vec{e}_p = p\vec{e}_p \quad (\vec{e}_p, \vec{e}_{p'}) = \delta(p - p') \quad (-\infty < p, p' < \infty). \quad (43)$$

Az \vec{e}_p vektorok szintén alkalmasak arra, hogy bázisként használjuk őket. Ha ezt tesszük, akkor azt mondjuk, hogy *impulzusreprezentációban* dolgozunk. Ekkor

$$\vec{\psi} = \int dp \cdot \psi(p)\vec{e}_p,$$

ahol $\psi(p)$ a $\vec{\psi}$ hullámfüggvénye impulzusreprezentációban.

Nem nehéz belátni, hogy impulzusreprezentációban a \hat{p} operátora a p -vel való szorzás:

$$\hat{p}\vec{\psi} = \hat{p} \int dp \cdot \psi(p)\vec{e}_p = (\hat{p} \text{ lineáris}) = \int dp \cdot \psi(p)\hat{p}\vec{e}_p = \int dp \cdot \psi(p)p\vec{e}_p.$$

De akkor az \hat{x} operátor impulzusreprezentációban nem lehet más, mint az impulzus szerinti deriválás $i\hbar$ -szorosa, ugyanis csak ebben az esetben teljesül a Heisenberg-féle felcserélési törvény:

$$\left[i\hbar \frac{d}{dp}, p \right] \psi = i\hbar \left(\frac{d}{dp}(p\psi) - p \frac{d\psi}{dp} \right) = i\hbar\psi.$$

Az \hat{x} és a \hat{p} sajátfüggvényeit impulzusreprezentációban ugyanazzal a gondolatmenettel lehet megtalálni, mint koordinátareprezentációban. Az impulzusoperátor c sajátértékhez tartozó deltára normált sajátfüggvényei az

$$e_c(p) = \delta(p - c)$$

függvények, a koordinátaoperátor sajátfüggvényei pedig az

$$e_x(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px}$$

exponensek. Mint látjuk, $e_x(p) = e_p(x)^*$. Ennek így is kell lennie, hiszen $e_p(x)$ — definíció szerint — az \vec{e}_p vetülete¹⁶ \vec{e}_x -re:

$$e_p(x) = (\vec{e}_x, \vec{e}_p),$$

¹⁶A vetület számítását a 6. és a 17.feladat képletei adják meg.

míg $e_x(p)$ — a definíciója szerint — az \vec{e}_x vetülete \vec{e}_p -re:

$$e_x(p) = (\vec{e}_p, \vec{e}_x).$$

A skalárszorzat hermiticitásából következik, hogy ezek egymás komplex konjugáltjai.

A reprezentáció választása ahhoz hasonló, mint amikor pl. mechanika feladat megoldásakor koordinátarendszert választunk. A választás önkényes, a célszerűség diktálja. Az értelmes fizikai kérdésekre adott válaszokat ugyanis mindig két operátor egy-egy sajátvektorának a *skalárszorzataként* kapjuk meg¹⁷, és a skalárszorzat értéke független a bázis megválasztásától.

A Hilbert-teret nem tudjuk másként elképzelni, mint két- vagy háromdimenziós valós vektorteret. Ez nagyon tökéletlen analógia, mégis minden problémánál tisztázni kell, mi felel meg az analóg feladatnak a háromdimenziós térben. Az analógia fontos eleme, hogy a háromdimenziós tér *objektumaival* (asztal, szék) a Hilbert térben a fizikai mennyiségek *operátorai* állíthatók párhuzamba: az operátorok ortonormált (vagy deltára normált) sajátvektor-rendszere felel meg az objektumokhoz rögzített (az objektumok orientációját meghatározó) irányoknak a geometriai térben. A fizikailag értelmes kérdések mindkét esetben az egyik kitüntetett bázisnak a másikhoz viszonyított relatív helyzetére vonatkoznak.

Függelék: A delta-függvény integrál-előállítás.

Legyen

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-b}^b e^{i\xi u} du = \delta_b(\xi). \quad (44)$$

Megmutatjuk, hogy $\delta_b(\xi)$ közelítő delta-függvény, mivel $b \rightarrow \infty$ -nél delta-függvénné válik.

A baloldali integrálás könnyen elvégezhető. Eredményül ezt kapjuk:

$$\delta_b(\xi) = \frac{\sin b\xi}{\pi\xi}.$$

Vegyünk most egy $f(\xi)$ -t, amely az origóban jól viselkedik és vizsgáljuk az

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \delta_b(\xi) d\xi = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \frac{\sin b\xi}{\xi} d\xi$$

integrált. A jobboldalon $\xi = x/b$ változóhelyettesítés után az

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \delta_b(\xi) d\xi = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f\left(\frac{x}{b}\right) \frac{\sin x}{x} dx$$

¹⁷Ld. az 5.állítás az előző fejezetben, valamint a *Mérési posztulátumok* c. fejezeteket.

egyenlőségre jutunk. Amikor $b \rightarrow \infty$, $f\left(\frac{x}{b}\right) \rightarrow f(0) = \textit{konstans}$ és a fennmaradó integrál értéke π :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin x}{x} dx = \pi.$$

Így

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \lim_{b \rightarrow \infty} \delta_b(\xi) d\xi = f(0),$$

ami mutatja, hogy $\lim_{b \rightarrow \infty} \delta_b(\xi) = \delta(\xi)$, ahogy állítottuk.

Ha most (44)-ben b -vel végtelenhez tartunk, a fontos

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\xi u} du = \delta(\xi) \quad (45)$$

képletre jutunk, amely igazolja (41) utolsó egyenlőségét.

37.Feladat: Mutassuk meg, hogy a $\vec{\psi} = N \cdot \int_a^b dx \cdot \vec{e}_x$ vektor alkalmas N választással 1-re normálható.

Megoldás:

$$\begin{aligned} (\vec{\psi}, \vec{\psi}) &= N^2 \int_a^b dx \int_a^b dx' (\vec{e}_x, \vec{e}_{x'}) = N^2 \int_a^b dx \int_a^b dx' \delta(x - x') = \\ &= N^2 \int_a^b dx = N^2(a - b) = 1, \end{aligned}$$

ahonnan $N = 1/\sqrt{a - b}$. ♣

Az \vec{e}_x sajátvektorok — mivel folytonos spektrumhoz tartoznak, — önmagukban nem normálhatók: $(\vec{e}_x, \vec{e}_x) = \delta(0) = \infty$. A feladat azonban mutatja, hogy ha ezekből a vektorokból *akármilyen szűk* (a, b) *intervallumra kiterjedő* superpozíciót képzünk, normálható vektort kapunk, amely meghatároz valamilyen fizikai állapotot. Ezt a tényt képletesen úgy is kifejezhetjük, hogy a folytonos spektrum deltára normált sajátállapotai (vagyis egy folytonos bázis vektorai) valójában "nagyon közel vannak" a normálható vektorokhoz.

38.Feladat: Az N alkalmas megválasztásával normáljuk 1-re a $\vec{\varphi} = N \int_{p_1}^{p_2} dp \cdot \vec{e}_p$ vektort, és számítsuk ki $\varphi(x)$ hullámfüggvényét koordinátareprezentációban.

Megoldás: Az előző feladathoz hasonlóan $N = 1/\sqrt{p_2 - p_1}$. Továbbá

$$\varphi(x) = (\vec{e}_x, \vec{\varphi}) = N \int_{p_1}^{p_2} dp (\vec{e}_x, \vec{e}_p) = N \int_{p_1}^{p_2} e_p(x) = (40) =$$

$$= \frac{N}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{p_1}^{p_2} dp e^{\frac{i}{\hbar}px} = \frac{N}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot \frac{\hbar}{x} \cdot \frac{1}{i} \left[e^{\frac{i}{\hbar}p_2x} - e^{\frac{i}{\hbar}p_1x} \right].$$

Ha $p_2 = p + \frac{1}{2}\Delta p$ és $p_1 = p - \frac{1}{2}\Delta p$, akkor $N = 1/\sqrt{\Delta p}$ és

$$\varphi(x) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi\Delta p}} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}px} \cdot \frac{2}{x} \cdot \frac{1}{2i} \left[e^{\frac{i}{\hbar}x \frac{\Delta p}{2}} - e^{-\frac{i}{\hbar}x \frac{\Delta p}{2}} \right] = \sqrt{\frac{2\hbar}{\pi\Delta p}} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}px} \cdot \frac{1}{x} \sin\left(\frac{x \cdot \Delta p}{2\hbar}\right),$$

amit még a

$$\varphi(x) = \sqrt{\frac{\Delta p}{2\pi\hbar}} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}px} \cdot \frac{\sin\left(\frac{x \cdot \Delta p}{2\hbar}\right)}{\left(\frac{x \cdot \Delta p}{2\hbar}\right)}$$

alakban is írhatunk.♣

3.24. A szabad tömegpont Hamilton-operátora

Az energia koordinátán és impulzuson keresztül kifejezett alakját *Hamilton-függvénynek*¹⁸, az energiaoperátor koordináta- és impulzus-operátoron keresztül kifejezett formáját *Hamilton-operátornak* nevezzük.

Az x -tengely mentén szabadon mozgó tömegpont Hamilton-operátora

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2.$$

A \hat{p} operátor \vec{e}_p sajátvektorai \hat{H} -nak is sajátvektorai $\frac{p^2}{2m}$ sajátértékkel:

$$\hat{H}\vec{e}_p = \frac{p^2}{2m} \vec{e}_p.$$

Bármilyen $p^2/2m$ lehet sajátérték. Mindegyikhez két egymásra ortogonális sajátvektor tartozik (\vec{e}_p és \vec{e}_{-p} a megfelelő p -vel), az energia-sajátértékek tehát kétszeresen elfajultak.

Általában, ha $F(p)$ a p polinómja (vagy Taylor-sorba fejthető függvénye), akkor

$$F(\hat{p})\vec{e}_p = F(p)\vec{e}_p.$$

Ez az állítás nyilvánvaló és összefér azzal a tétellel, hogy két operátornak csak akkor van közös sajátvektorrendszere, ha felcserélhetők egymással (kommutálnak).

Hasonlóan,

$$F(\hat{x})\vec{e}_x = F(x)\vec{e}_x.$$

¹⁸Mechanika 1.30 fejezet.

3.25. A harmonikus oszcillátor Hamilton-operátora

A címbeli Hamilton-operátor a következő:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{D}{2}\hat{x}^2 = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 = \frac{m\omega^2}{2} \left(\hat{x}^2 + \frac{1}{m^2\omega^2}\hat{p}^2 \right).$$

Ennek az operátornak keressük az E sajátértékeit és \vec{e}_E sajátvektorait.

Az operátor két tagból áll. Az előző fejezet alapján a kinetikus-tag sajátvektorai az \vec{e}_p -k, a potenciális-energiái az \vec{e}_x -k. Mindkettő folytonos bázist alkot. Az *összeg* \vec{e}_E sajátvektorai természetesen ezek egyikével sem egyeznek meg és — mint látni fogjuk —, *diszkrét* bázis elemei.

Vezessük be az

$$\left. \begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p} \right) \\ a^+ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p} \right) \end{aligned} \right\} \quad (46)$$

operátorokat, amelyek egymás adjungáltjai (a jelölés standard, nem szokás kalapot tenni rájuk).

Megmutatjuk, hogy

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

Igazolás:

$$\begin{aligned} \hbar\omega \left(a^+a + \frac{1}{2} \right) &= \frac{m\omega^2}{2} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p} \right) \cdot \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p} \right) + \frac{1}{2}\hbar\omega = \\ &= \frac{m\omega^2}{2} \left(\hat{x}^2 + \frac{1}{m^2\omega^2}\hat{p}^2 \right) + \frac{i\omega}{2} [\hat{x}, \hat{p}] + \frac{1}{2}\hbar\omega, \end{aligned}$$

és ez valóban \hat{H} -val egyenlő, mivel az utolsó két tag összege — a (35) következtében — zérus.

A \hat{H} -t célszerű

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{n} + 1/2), \quad (47)$$

alakban írni, amelyben

$$\hat{n} = a^+a.$$

Az

$$\left(\hat{f}\hat{g} \right)^+ = \hat{g}^+\hat{f}^+ \quad (48)$$

képletből következik, hogy \hat{n} hermitikus. A sajátértékegyenlete

$$\hat{n}\vec{e}_n = n\vec{e}_n.$$

A \vec{e}_n sajátvektorok azonosak a \hat{H} sajátvektoraival és az n sajátértékek alapján egyszerűen kiszámítható E : $E \equiv E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$.

A \hat{H} helyett előnyösebb \hat{n} -el dolgozni. A jelölés sugallja, hogy az n sajátérték egész szám. Hamarosan kiderül, hogy ez így is van, de most még tetszőleges valósnak kell tekintenünk.

39.Feladat: Igazoljuk a következő képleteket

$$[a, a^+] = 1 \quad (49)$$

$$[\hat{n}, a^+] = a^+ \quad (50)$$

$$[a, \hat{n}] = a. \quad (51)$$

Igazolás: A (49) egy lépésben visszavezethető (35)-ra.

A (50) igazolása:

$$\hat{n}a^+ = a^+aa^+ = a^+(aa^+) = (49) = a^+(1 + a^+a) = a^+(1 + \hat{n}) = a^+ + a^+\hat{n},$$

ahonnan leolvasható (50).

A (51) a (50) adjungálásával kapható.♣

40.Feladat: Igazoljuk, hogy \hat{n} -nek nincs negatív sajátértéke.

Igazolás:

$$(\vec{e}_n, \hat{n}\vec{e}_n) = n(\vec{e}_n, \vec{e}_n) = (\vec{e}_n, a^+a\vec{e}_n) = (a\vec{e}_n, a\vec{e}_n).$$

Mivel $(\vec{e}_n, \vec{e}_n) > 0$ és $(a\vec{e}_n, a\vec{e}_n) \geq 0$, ezért $n \geq 0$. ♣

41.Feladat: Igazoljuk, hogy $a^+\vec{e}_n$ az \hat{n} operátor $(n + 1)$ sajátértékhez tartozó sajátvektora, azaz

$$\hat{n}(a^+\vec{e}_n) = (n + 1)a^+\vec{e}_n.$$

Igazolás:

$$\hat{n}(a^+\vec{e}_n) = (50) = (a^+\hat{n} + a^+)a\vec{e}_n = (n + 1)a^+\vec{e}_n.$$

Látni fogjuk (43.feladat), hogy $a^+\vec{e}_n \neq 0$, ezért ha n sajátértéke \hat{n} -nek, akkor az összes $(n + 1)$, $(n + 2)$, $(n + 3)$, ... is sajátérték, mert mindhez tartozik (nemzérus) sajátvektor.♣

Terminológia: Az a^+ és az a operátorokat *léptető operátoroknak* nevezzük. Speciálisan az a^+ *növelő*, vagy *keltő*, az a *csökkentő* vagy *eltüntető* operátor. Ez utóbbi elnevezést a következő feladat indokolja:

42.Feladat: Igazoljuk, hogy $a\vec{e}_n$ az \hat{n} operátor $(n - 1)$ sajátértékhez tartozó sajátvektora, azaz

$$\hat{n}(a\vec{e}_n) = (n - 1)a\vec{e}_n. \clubsuit$$

Következmény: ha n sajátértéke \hat{n} -nek, akkor az összes $(n-1)$, $(n-2)$, $(n-3)$, ... is sajátérték.

Láttuk, hogy \hat{n} -nek nincs negatív sajátértéke. A sajátértékek csökkenő sorozatának ezért meg *kell* szakadnia egy $n_{min} \geq 0$ értéknél, ami akkor következik be, ha $a\vec{e}_{n_{min}} = 0$. Mekkora ez az n_{min} ? Ezt úgy tudhatjuk meg, hogy \hat{n} -el hatunk $\vec{e}_{n_{min}}$ -re: $\hat{n}\vec{e}_{n_{min}} = n_{min}\vec{e}_{n_{min}}$. De $\hat{n} = a^+a$ és $a\vec{e}_{n_{min}} = 0$, ezért

$$\hat{n}\vec{e}_{n_{min}} = n_{min}\vec{e}_{n_{min}} = 0,$$

ahonnan következik, hogy $n_{min} = 0$.

Összefoglalóan megállapíthatjuk, hogy az

$$\hat{n}\vec{e}_n = n\vec{e}_n$$

sajátértékegyenletben az n sajátértékek a nemnegatív egész számok, és az $n = 0$ -hoz tartozó $\vec{e}_{n=0}$ sajátvektort az eltüntető operátor nullába viszi át¹⁹:

$$a\vec{e}_{n=0} = 0. \quad (52)$$

A (47) alapján az \vec{e}_n -k \hat{H} -nak is sajátvektorai

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (53)$$

sajátértékekkel. Ezek a harmónikus oszcillátor lehetséges energiái. A képlet csaknem pontosan azonos a Planck által megállapított (1) képlettel, amely a Bohr-Sommerfeld modellből is megkapható (3.8 fejezet), annak ellenére, hogy ez a mostani tárgyalás még csak nem is emlékeztet a Bohr-Sommerfeld modellben végzett számításra. Az energiaszintek közötti távolság mindkét képlet szerint $\hbar\omega$ -val egyenlő. Az alapállapot E_0 energiája azonban Planck képlete szerint nulla, a kvantummechanikai (53) alapján viszont $\frac{1}{2}\hbar\omega$, amelyet *zéruspont energiának*, vagy *nullpontenergiának* neveznek. A nullpontenergia léte kísérletekben igazolható.

43.Feladat: Mutassuk meg, hogy

$$a^+\vec{e}_n = \sqrt{n+1} \cdot \vec{e}_{n+1} \quad (54)$$

$$a\vec{e}_n = \sqrt{n} \cdot \vec{e}_{n-1}. \quad (55)$$

A (54) igazolása: Azt már tudjuk (41.feladat), hogy a baloldal *arányos* \vec{e}_{n+1} -el. Csak a $\sqrt{n+1}$ arányossági tényező helyességét kell igazolni annak alapján, hogy az \vec{e}_n és

¹⁹A következő fejezetben látni fogjuk, hogy (52)-nek csak egy megoldása van, ezért az \vec{e}_0 sajátvektorhoz, valamint a belőle a keltő operátor segítségével képezhető $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots$ vektorokhoz tartozó sajátértékek egyike sem elfajult.

az \vec{e}_{n+1} normája ugyanaz (és 1-el egyenlő):

$$\begin{aligned} (\vec{e}_{n+1}, \vec{e}_{n+1}) &= \frac{1}{n+1} (a^+ \vec{e}_n, a^+ \vec{e}_n) = \frac{1}{n+1} (\vec{e}_n, a a^+ \vec{e}_n) = (49) = \\ &= \frac{1}{n+1} (\vec{e}_n, (a^+ a + 1) \vec{e}_n) = \frac{1}{n+1} (\vec{e}_n, (\hat{n} + 1) \vec{e}_n) = (\vec{e}_n, \vec{e}_n). \end{aligned}$$

Ez az egyenlőség mutatja, hogy ha $\vec{e}_n \neq 0$, akkor $a^+ \vec{e}_n$ nem lehet nullvektor.

A (55) hasonló módon igazolható, vagy pedig úgy, hogy (54)-re a -val hatunk. ♣

3.26. A harmonikus oszcillátor Hamilton-operátorának sajátfüggvényei

Az \vec{e}_x ($-\infty < x < \infty$), az \vec{e}_p ($-\infty < p < \infty$) és az \vec{e}_n ($n = 0, 1, 2, \dots$) vektorok három deltára normált, ill. ortonormált bázist feszítenek ki a \mathcal{H}_x Hilbert-térben. Ezek *különböző* bázisok, ugyanis az egyik bázis bármely kiválasztott elemének a másik két bázis összes bázisvektorára van nemzérus vetülete. Emlékeztetünk rá, hogy egy $\vec{\psi}$ vektornak egy \vec{e} egységvektorra vetett vetületét az $(\vec{e}, \vec{\psi})$ skalárszorzat adja meg, ezért az \vec{e}_n bázisvektornak a másik két bázis elemeire vetett vetületei az

$$(\vec{e}_x, \vec{e}_n) = e_n(x) \quad (\vec{e}_p, \vec{e}_n) = e_n(p)$$

függvények, amelyek a lineáris harmonikus oszcillátor energiasajátállapotainak hullámfüggvényei koordináta- és impulzusreprezentációban. Ezek a hullámfüggvények (energia-sajátfüggvények) mutatják meg, hogyan van orientálva az \vec{e}_n diszkrét bázis az \vec{e}_x , \vec{e}_p folytonos bázisokhoz képest \mathcal{H}_x -ben. Ebben a fejezetben az $e_n(x)$ és az $e_n(p)$ sajátfüggvények meghatározásával foglalkozunk.

Az *alapállapot* $e_{n=0}(x)$ hullámfüggvénye az (52)-ből határozható meg, ha a -t (46)-ból vesszük és felhasználjuk az \hat{x} és a \hat{p} alakját koordináta-reprezentációban:

$$\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) \vec{e}_{n=0} = 0, \quad (56)$$

ahonnan

$$\left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) e_{n=0}(x) = 0. \quad (57)$$

Ennek az egyenletnek csak egy differenciálható megoldása van:

$$e_{n=0}(x) = C \cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}.$$

Ez normálható, és akkor lesz 1-re normált, ha $C = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4}$.

44.Feladat: Határozzuk meg az alapállapot hullámfüggvényét impulzus-reprezentációban.

Megoldás: Impulzusreprezentációban $\hat{x} = i\hbar \frac{d}{dp}$, $\hat{p} = p$. Írjuk ezeket (56)-ba:

$$\left(p + m\hbar\omega \frac{d}{dp} \right) e_{n=0}(p) = 0,$$

amelynek megoldását $e_0(x)$ -ből az $x \rightarrow p$, $m\omega \rightarrow \frac{1}{m\omega}$ helyettesítéssel kapjuk:

$$e_{n=0}(p) = C' \cdot e^{-\frac{p^2}{2\hbar m\omega}} \quad C' = \left(\frac{1}{\pi\hbar m\omega} \right)^{1/4} \cdot \clubsuit$$

A (54)-ből következik, hogy

$$\vec{e}_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n \vec{e}_0.$$

Ez a képlet lehetővé teszi az összes $e_n(x)$ meghatározását $e_0(x)$ alapján. Koordináta reprezentációban ugyanis

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right),$$

ahol

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x$$

x -t helyettesítő dimenziótlán változó. A ξ felhasználásával az alapállapot hullámfüggvénye így írható:

$$e_{n=0}(x) = C e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \Bigg|_{\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x}.$$

Ezek alapján

$$e_n(x) = \frac{C}{\sqrt{n!}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^n \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \Bigg|_{\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x}.$$

A jobboldal kifejezhető a H_n Hermite-polinómon keresztül, amelyeket a

$$H_n(\xi) \cdot e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

összefüggés definiál:

$$e_n(x) = \frac{C}{\sqrt{n!}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^n H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \Big|_{\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x} .$$

45.Feladat: Mutassuk meg, hogy

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1 \\ H_1(\xi) &= 2\xi \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 1 \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi \\ H_4(\xi) &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12 \quad \text{s í.t.} \end{aligned}$$

és a Hermite-polinómok segítségével diszkutáljuk az alacsony indexű $e_n(x)$ energiasajátfüggvényeket.♣

3.27. A mérési posztulátumok (diszkrét spektrum)

Ebben és a következő fejezetben két kérdésre keressük a választ:

Ha a $\vec{\psi}$ állapotú részecskén megmérjük az \mathcal{A} fizikai mennyiség értékét, akkor

1)mi lesz a mérés eredménye, és

2)mi lesz a részecske állapotvektora közvetlenül a mérés után?

Az első kérdésre a *Born-hipotézis*, a másodikra a *projekciós posztulátum* adja meg a választ. Ezek a kvantumelmélet *mérési posztulátumai*.

Legyen az \mathcal{A} -nak megfelelő \hat{A} operátor spektruma diszkrét:

$$\hat{A}\vec{e}_i = a_i\vec{e}_i.$$

A mérés eredménye az a_i sajátértékek valamelyike. De közülük melyik? Amikor a $\vec{\psi}$ történetesen éppen — mondjuk — \vec{e}_1 , akkor a mérés a_1 -t ad. De mi van akkor, ha $\vec{\psi}$ egyik sajátvektorral sem egyezik meg, hanem az \vec{e}_n sajátvektorok tetszőleges

$$\vec{\psi} = \psi_1\vec{e}_1 + \psi_2\vec{e}_2 + \psi_3\vec{e}_3 + \dots \quad (58)$$

szuperpozíciója?

A Born-hipotézis szerint ebben az esetben a mérés eredménye lehet *bármely* sajátérték. Annak W_i valószínűsége, hogy az a_i sajátértéket kapjuk, $|\psi_i|^2$ -el, a $\vec{\psi}$ vektor \vec{e}_i -re vetett vetületének abszolút érték négyzetével egyenlő²⁰:

$$W_i = |(\vec{e}_i, \vec{\psi})|^2. \quad (59)$$

²⁰Ezt a szabályt a 3.22 fejezetben előzetesen már megfogalmaztuk.

Valószínűségekről lévén szó, az előírás helyességét csak úgy ellenőrizhetjük, ha nagyon sok olyan részecskén (*anszaml*) végezzük el \mathcal{A} mérését, amelyek mindegyike ugyanabban a $\vec{\psi}$ állapotban van. Legyen az elvégzett mérések száma N és legyen N_i azoknak az eseteknek a száma, amikor a_i -t kaptunk mérési eredményként. Akkor $N \rightarrow \infty$ -nél az N_i/N *relatív gyakoriság* W_i -hez tart:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_i}{N} = W_i = |(\vec{e}_i, \vec{\psi})|^2.$$

46.Feladat: Mutassuk meg, hogy ha $\vec{\psi}$ 1-re normált, akkor

$$\sum_{i=1}^{\infty} W_i = \sum_{i=1}^{\infty} |(\vec{e}_i, \vec{\psi})|^2 = 1$$

(az összegzés az \vec{e}_i -kre történik).

Igazolás: Az \vec{e}_i -k teljes ortonormált bázist alkotnak és $(\vec{e}_i, \vec{\psi}) = \psi_i$ a $\vec{\psi}$ vetülete \vec{e}_i -re. Mivel $\vec{\psi}$ 1-re normált, ezért vetületek abszolút-érték négyzeteiből képzett összeg — ami éppen $\sum_{i=1}^{\infty} W_i$, — 1-el egyenlő.♣

47.Feladat: Igazoljuk, hogy $\vec{\psi}$ és $e^{i\varphi}\vec{\psi}$ két olyan állapotvektor, amelyek között semmilyen méréssel sem lehet különbséget tenni és ezért ugyanazt a fizikai állapotot reprezentálják.

Igazolás: Akármilyen fizikai mennyiséget mérünk is, a mérési eredményeket meghatározó valószínűségek mindkét állapotvektorra azonosak:

$$|(\vec{e}_i, e^{i\varphi}\vec{\psi})|^2 = |(\vec{e}_i, \vec{\psi})|^2.$$

Ez a magyarázata annak, hogy $\vec{\psi}$ és $e^{i\varphi}\vec{\psi}$ ugyanazt a fizikai állapotot írja le (3.21 fejezet).♣

48.Feladat: Mutassuk meg, hogy a mérési eredmények átlagértéke (várható értéke) $(\vec{\psi}, \hat{A}\vec{\psi})$ -vel egyenlő.

Igazolás: Jelöljük az átlagértéket $\langle \hat{A} \rangle$ -el. A mérési eredmények átlagértékén — a szokásos módon — a valószínűségükkel súlyozott összegüket értjük:

$$\langle \hat{A} \rangle \equiv a_1 W_1 + a_2 W_2 + a_3 W_3 + \dots = a_1 |\psi_1|^2 + a_2 |\psi_2|^2 + a_3 |\psi_3|^2 + \dots$$

Ez az összeg az (58), valamint az

$$\hat{A}\vec{\psi} = \psi_1 a_1 \vec{e}_1 + \psi_2 a_2 \vec{e}_2 + \psi_3 a_3 \vec{e}_3 + \dots$$

vektorok skalárszorzata, tehát valóban

$$\langle \hat{A} \rangle = (\vec{\psi}, \hat{A}\vec{\psi}). \clubsuit$$

Áttérünk a 2.kérdésre. A projekciós posztulátum szerint az a_i eredményt adó mérés utáni pillanatban az állapotvektor már nem az eredeti $\vec{\psi}$, hanem a $\vec{\psi}$ 1-re normált vetülete az \vec{e}_i irányra (tehát maga \vec{e}_i):

$$a_i \text{ kimenetelű mérésnél} \quad \vec{\psi} \Longrightarrow \vec{e}_i.$$

Ezt úgy szokás kifejezni, hogy az állapotvektor „beugrik” az \vec{e}_i állapotba. Az ugrást magát az *állapotvektor redukciójának* nevezik.

49.Feladat: Mutassuk meg, hogy ha egy a_i kimenetelű mérés után azonnal újra mérjük az \mathcal{A} mennyiséget, megint ugyanazt az a_i -t kapjuk eredményül.

Igazolás: A második mérés már az \vec{e}_i állapotvektorú rendszeren történik, amelynek csak \vec{e}_i irányú vetülete van.♣

A projekciós posztulátumot *éppen ez a következménye* indokolja: a mérés fogalmába logikus beleérteni, hogy egy azonnal megismételt mérés ne vezethessen az előzőtől különböző eredményre.

Előfordulhat, hogy a mérés eredményéből csupán annyi következik, hogy a mért mennyiség egy olyan intervallumba esik, amely több különböző sajátértéket is tartalmaz. Ha pl. az (58) állapotú rendszeren \mathcal{A} -t megmérve csak annyi derül ki, hogy a mennyiség értéke a_2 , a_3 vagy a_4 , akkor logikus feltenni, hogy a mérés utáni pillanatban a hullámfüggvényben csak az ezekhez a sajátértékekhez tartozó komponensek maradnak meg:

$$\vec{\psi} = \psi_1 \vec{e}_1 + \psi_2 \vec{e}_2 + \dots \Longrightarrow N(\psi_2 \vec{e}_2 + \psi_3 \vec{e}_3 + \psi_4 \vec{e}_4).$$

Lényeges, hogy a képlet jobboldalán ψ_2 , ψ_3 és ψ_4 ugyanaz, mint a baloldalon.

A redukció utáni hullámfüggvény csak akkor lesz 1-re normált, ha

$$N = \frac{1}{\sqrt{|\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + |\psi_4|^2}}.$$

Vegyük észre, hogy a gyökjel alatti összeg annak a mérési eredménynek a valószínűsége, amelyet példának tekintettünk.

A projekciós posztulátum némileg pongyolán, de lényegében helyesen így is megfogalmazható: A mérés utáni állapotvektort úgy kapjuk meg, hogy a mérés előtt érvényes állapotvektorból *kihúzzuk* azokat a komponenseket, amelyek ellentmondanak a mérés eredményének, és ezt a csonkított állapotvektort 1-re normáljuk.

Térjünk vissza a korábban tárgyalt anszamlhoz, amely N db $\vec{\psi}$ állapotú részecskéből áll. Ha mindegyiken elvégezzük az \mathcal{A} mennyiség mérését, már nem lesz mindegyik részecskének ugyanaz az állapotvektora: N_1 -nek az állapotvektora \vec{e}_1 lesz, N_2 -é \vec{e}_2 s í.t.

Ezt úgy szokás kifejezni, hogy az eredetileg *tiszta állapotú* anszaml a mérés hatására *keverékké* válik, amelyben W_i valószínűséggel találunk \vec{e}_i állapotú rendszert (részecskét).

A projekciós posztulátumból következik, hogy a mikrofizikában a mérés *drasztikusan* megváltoztatja annak a mikroobjektumnak az állapotát, amelyen a mérést végezzük: a $\vec{\psi} \implies \vec{e}_i$ redukcióban a kezdeti $\vec{\psi}$ és végső \vec{e}_i semmilyen értelemben sincs „közel” egymáshoz. A mérés a makroszkópikus fizikában is okoz változást a makroobjektumok állapotában (a koordináta és/vagy az impulzus nagyságában), de a mérési eljárás tökéletesítésével ez a változás *tetszőlegesen kicsivé tehető*.

A kvantumelmélet érvényességi tartományában ilyen lehetőség nincs: képletesen szólva, amint „ránézünk” egy mikroobjektumra, az állapota már meg is változott annyira, hogy az eredeti állapotára nem is hasonlít. Ráadásul ez a változás véletlenszerű, a $\vec{\psi} \implies \vec{e}_i$ beugrás W_i valószínűséggel történik.

50.Feladat: Legyen \mathcal{H}_x modellje a $D = 2$ komplex vektortér. A fizikai állapotot reprezentálja a $\vec{\psi} = \frac{1}{2}(1 + i, \sqrt{2})$ vektor, és ezen végezzük el annak a fizikai mennyiségnek a mérését, amelynek az operátora σ_x (ld. a 23.feladatot). Analizáljuk a mérési eredményeket.

Megoldás: A 33.feladat szerint σ_x két sajátértéke ± 1 , sajátvektorai pedig az \vec{u}_{\pm} -k. Ezért

$$W_{\pm} = |(\vec{u}_{\pm}, \vec{\psi})|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1+i}{2} \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{\sqrt{2}}{2} \right|^2 = \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{2}}{4}.$$

A $\vec{\psi}$ tiszta állapotú anszamblon végzett mérések után keveréket kapunk, amelyben az \vec{u}_{\pm} állapotú rendszer valószínűsége a talált W_{\pm} al egyenlő. ♣

51.Feladat: Legyen \mathcal{H}_x modellje a $D = 3$ valós vektortér. A fizikai állapotot reprezentálja a $\vec{\psi} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0 \right)$ vektor, és ezen végezzük el annak a fizikai mennyiségnek a mérését, amelynek az operátora a 36.feladat \hat{f} -je. Analizáljuk a mérési eredményeket.

Megoldás: Az \hat{f} sajátértékei $-2, 6, 6$, a megfelelő sajátvektorok az $\vec{\eta}_i$ -k (ld. a feladatot).

$$W_{-2} = |(\vec{\eta}_1, \vec{\psi})|^2 = \frac{1}{4}.$$

Innen már tudjuk, hogy $W_6 = \frac{3}{4}$.

A -2 kimenetelű mérés az $\vec{\psi} \implies \vec{\eta}_1$ redukcióval jár együtt, de mi lesz az állapotvektor egy 6 kimenetelű mérés után? Ahhoz, hogy erre a kérdésre válaszolni tudjunk, a $\vec{\psi}$ -t az \hat{f} sajátvektorai szerint kell kifejtenuünk, mert csak ekkor tudjuk "kihúzni" belőle az $\vec{\eta}_1$ irányú komponenst:

$$\vec{\psi} = (\vec{\eta}_1, \vec{\psi})\vec{\eta}_1 + (\vec{\eta}_2, \vec{\psi})\vec{\eta}_2 + (\vec{\eta}_3, \vec{\psi})\vec{\eta}_3 = \frac{1}{2}\vec{\eta}_1 + \frac{1}{2}\vec{\eta}_2 + \frac{1}{\sqrt{2}}\vec{\eta}_3 \implies$$

$$\Rightarrow N \cdot \left(\frac{1}{2} \vec{\eta}_2 + \frac{1}{\sqrt{2}} \vec{\eta}_3 \right) = \frac{1}{\sqrt{3}} \vec{\eta}_2 + \sqrt{\frac{2}{3}} \vec{\eta}_3,$$

mert

$$N = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{4} + \frac{1}{2}}} = \frac{2}{\sqrt{3}}. \clubsuit$$

52.Feladat: Legyen a lineáris harmonikus oszcillátor hullámfüggvénye

$$\psi(x) = N \cdot e^{-\sqrt{m\omega/\hbar} \cdot |x|},$$

és tegyük föl, hogy megmérjük az energiáját. Milyen valószínűséggel kapunk $\frac{1}{2}\hbar\omega$ -t?

Megoldás: Először normálni kell $\psi(x)$ -t:

$$1 = 2N^2 \int_0^\infty e^{-2\sqrt{m\omega/\hbar} \cdot x} dx = N^2 \cdot \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}},$$

ahonnan $N = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/4} = C\pi^{1/4}$. A keresett valószínűség $W_0 = |\psi_0|^2$, amelyben

$$\begin{aligned} \psi_0 &= (\vec{e}_{n=0}, \vec{\psi}) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e_{n=0}^*(x) \cdot \psi(x) = 2CN \int_0^\infty dx e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 - \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x} = \\ &= 2CN \int_0^\infty dx e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} \left(x + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\right)^2} + 1/2 = 2CN\sqrt{e} \int_{\sqrt{\hbar/m\omega}}^\infty dy e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}y^2} = \\ &= 2CN\sqrt{e}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_1^\infty dz e^{-\frac{1}{2}z^2} = 2 \cdot e^{1/2} \cdot \pi^{-1/4} \int_1^\infty dz e^{-\frac{1}{2}z^2} = 0.984995. \end{aligned}$$

A valószínűség ennek a négyzete: $W_0 \approx 0.97$, tehát a mérések 97%-ában találjuk azt, hogy az adott állapotú oszcillátor energiája a lehető legalacsonyabb. Ezt úgy is szokták mondani, hogy a mérések 97%-ában találjuk az oszcillátort alapállapotban, ami igazából a mérés utáni pillanat állapotára vonatkozik.

Hasonlóan lehet kiszámítani a többi energia találati valószínűségét is. Mivel $\psi(x)$ páros függvény, a páratlan n -jű $e_n(x)$ -k pedig páratlan függvények, ezért $\psi_1 = \psi_3 = \psi_5 = \dots = 0$, míg $\psi_2 = -0.0350133$ ($W_2 = 0.00122593$), $\psi_4 = 0.140417$ ($W_4 = 0.0197168$). Az első három nemzérus valószínűség összege $W_0 + W_2 + W_4 = 0.991158$.

♣

53.Feladat: Az 52.feladatban megadott $\vec{\psi}$ állapotú harmonikus oszcillátoron energiamérést végzünk, amelyből csak az dönthető el, hogy az oszcillátor alapállapotban van vagy sem. Mi lesz az olyan mérés utáni hullámfüggvény, amely azt adja, hogy az oszcillátor *nincs* alapállapotban?

Megoldás: Ahhoz, hogy a projekciós posztulátum szerint "kihúzhassuk" az állapotvektornak azokat a komponenseit, amelyeknek a mérési eredmény ellentmond, a $\vec{\psi}$ -t az energia-operátor \vec{e}_n bázisvektorai szerint kell kifejtetni:

$$\vec{\psi} = \psi_0 \vec{e}_{n=0} + \psi_1 \vec{e}_{n=1} + \dots$$

Csak az első tag mond ellent a mérési eredménynek, ezért

$$\vec{\psi} \implies N \cdot (\psi_1 \vec{e}_{n=1} + \dots) = N \cdot (\vec{\psi} - \psi_0 \vec{e}_{n=0}),$$

ahol $N = 1/\sqrt{1 - \psi_0^2}$.

3.28. A mérési posztulátumok (folytonos spektrum)

Legyen most a mérendő \mathcal{A} mennyiség \hat{A} operátorának a spektruma folytonos valamilyen intervallumban:

$$\hat{A} \vec{e}_a = a \vec{e}_a \quad (a_{min} < a < a_{max}).$$

Amikor lehetséges kimenetek kontinuumot képeznek, nem lehet megfelekedezni arról, hogy a mért érték szükségképpen pontatlan, bár a hiba — még a kvantumelméletben is, — csökkenthető a mérés tökéletesítésével. Nem értelmes tehát folytonos spektrum esetében annak valószínűségéről beszélni, hogy a mérés eredménye pontosan a . Legfeljebb a -beli *intervallumokról* lehet szó.

A helyes kérdésfeltevés tehát a következő: Mi a $W(a_1, a_2)$ valószínűsége annak, hogy egy $\vec{\psi}$ állapotú rendszeren mérve \mathcal{A} -t a mérés eredménye a folytonos spektrum (a_1, a_2) szakaszában legyen?

A Born-hipotézis szerint ebben az esetben a válasz:

$$W(a_1, a_2) = \int_{a_1}^{a_2} |(\vec{e}_a, \vec{\psi})|^2 \cdot da,$$

amelyben

$$w(a) = |(\vec{e}_a, \vec{\psi})|^2$$

a *valószínűségi sűrűség*.

Speciálisan nagyon kis Δa -nál, amikor $a_1 = a - \frac{1}{2} \Delta a$, $a_2 = a + \frac{1}{2} \Delta a$

$$W(a_1, a_2) \approx |(\vec{e}_a, \vec{\psi})|^2 \cdot \Delta a = w(a) \cdot \Delta a.$$

54.Feladat: Legyen a tömegpont harmonikus oszcillátor és legyen az n -ik kvantumállapotban ($n = 0, 1, 2, 3$). Koordinátamérésnél milyen $w_n(x)$ valószínűségi sűrűséggel kapjuk a különböző x -értékeket eredményül? Ábrázoljuk a $w_n(x)$ görbéket.

Megoldás: Alapállapotban például

$$w_0(x) = |(\vec{e}_x, \vec{e}_{n=0})|^2 = |e_{n=0}(x)|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \clubsuit$$

55.Feladat: Milyen valószínűségi sűrűséggel találjuk a harmonikus oszcillátor alapállapotában lévő részecske impulzusát p -nek?

Megoldás:

$$w_0(p) = |(\vec{e}_p, \vec{e}_{n=0})|^2 = |e_{n=0}(p)|^2 = \sqrt{\frac{1}{\pi\hbar m\omega}} e^{-\frac{1}{\hbar m\omega}p^2} \clubsuit$$

56.Feladat: Egy klasszikus oszcillátor energiáját és amplitúdóját az $A^2 = \frac{2E}{m\omega^2}$ kapcsolja össze. Az oszcilláló tömegpont számára az $x > A$ tartomány *tiltott*, mert itt $E < U$, a kinetikus energia negatív és a sebesség képzetes. A kvantummechanikai oszcillátorra ez a tiltás nem érvényes. Határozzuk meg annak W valószínűségét, hogy az alapállapotú oszcillátort a klasszikusan tiltott tartományban találjuk.

Megoldás: Alapállapotban $E = E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$, ahonnan $A^2 = A_0^2 = \frac{\hbar}{m\omega}$.

$$W = 2 \int_{A_0}^{\infty} dx |\psi_0(x)|^2 = 2C^2 \int_{A_0}^{\infty} dx e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_1^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} = 0.157298.$$

A mérések 16%-ában az oszcilláló tömegpontot a klasszikusan tiltott tartományban találjuk. ♣

Áttérünk a 2.kérdésre. Legyünk a határozottság kedvéért x -reprezentációban. A $\vec{\psi}$ állapotú rendszeren, amelynek a hullámfüggvénye $\psi(x)$, megmérjük a koordinátát és azt találjuk, hogy az $x_1 < x < x_2$ intervallumban van. Ennél pontosabb információval a mérés nem szolgál. Mi lesz az állapotvektor a mérés utáni pillanatban?

A mérés előtt az állapotvektor

$$\vec{\psi} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \psi(x) \cdot \vec{e}_x.$$

A mérés utáni pillanatban pontosan tudjuk, hogy a tömegpont *nincs* az $x < x_1$ és az $x > x_2$ tartományban. Ennél pontosabb információ nem áll rendelkezésünkre. A leglogikusabb ezért azt feltenni, hogy a mérés utáni állapotot $\vec{\psi}$ -ből úgy kapjuk, hogy kihagyjuk belőle azokat a komponenseket, amelyek az $x < x_1$, $x > x_2$ tartományba esnek:

$$\vec{\psi} \implies \vec{\varphi} = N \int_{x_1}^{x_2} dx \cdot \psi(x) \cdot \vec{e}_x.$$

Az előző fejezetben ugyanezt az elvet alkalmaztuk a mérés utáni állapot meghatározására.

A $\vec{\varphi}$ vektor minden $x_1 < x_2$ -nél normálható, akármilyen közel is van a két érték egymáshoz²¹. Ezt így láthatjuk be:

$$\begin{aligned} (\vec{\varphi}, \vec{\varphi}) &= N^2 \int_{x_1}^{x_2} dx \int_{x_1}^{x_2} dx' \cdot \psi^*(x') \psi(x) \cdot (\vec{e}_{x'}, \vec{e}_x) = \\ &= N^2 \int_{x_1}^{x_2} dx \int_{x_1}^{x_2} dx' \cdot \psi^*(x') \psi(x) \cdot \delta(x' - x) = \\ &= N^2 \int_{x_1}^{x_2} dx \cdot \psi^*(x) \psi(x) = N^2 \int_{x_1}^{x_2} dx \cdot |\psi(x)|^2 < \infty. \end{aligned}$$

Ennek alapján az N szorzót meg lehet úgy választani, hogy $\vec{\varphi}$ normált legyen:

$$\begin{aligned} N &= \left[\sqrt{\int_{x_1}^{x_2} dx \cdot |\psi(x)|^2} \right]^{-1} = \left[\sqrt{W(x_1, x_2)} \right]^{-1}. \\ \vec{\psi} \implies \vec{\varphi} &= \frac{1}{\sqrt{W(x_1, x_2)}} \int_{x_1}^{x_2} dx \cdot \psi(x) \cdot \vec{e}_x. \end{aligned}$$

Ez utóbbi képletekben $W(x_1, x_2)$ annak valószínűsége, hogy a koordinátát az $x_1 < x < x_2$ intervallumban találjuk.

Amikor egy $\vec{\psi}$ állapotú rendszeren egy folytonos spektrumú fizikai mennyiség értékét mérjük, a mérési eredmények átlagát — összeg helyett — a sajátértékek valószínűségi sűrűséggel súlyozott *integrálja* adja meg. Koordinátamérésnél pl.

$$\langle \hat{x} \rangle = (\vec{\psi}, \hat{x} \vec{\psi}) = \int x |\psi(x)|^2 \cdot dx.$$

Általános megjegyzés: A kvantumelméletnek azokat a posztulátumait, amelyeket a két utolsó fejezetben tárgyaltunk, nem lehet bármilyen esetben részletes kísérleti ellenőrzésnek alávetni. Egy elektron helyét vagy impulzusát valójában lehetetlen „megmérni” egy atomon belül. Egy bevezető kurzusban mégis ilyen eseteken szokás illusztrálni a mérési posztulátumok működését, mert azoknak a feladatoknak a tárgyalására, amelyekben a tényleges ellenőrzés lehetséges és fontos, a kurzus bevezető részében még nincs mód. Ebben a jegyzetben elsősorban a neutronok interferenciájának és a spinkorrelációs kísérleteknek az analízisének lesz alkalmunk a mérési posztulátumokat "működés közben" bemutatni. Born az ütközéssel kapcsolatos reakciók és a bomlási folyamatok tárgyalása kapcsán vezette be a posztulátumát annak érdekében, hogy a centrumból kirepülő részecskék energia- és szögeloszlását megállapíthassa a hullámfüggvény alapján. Az ilyen típusú kísérletekre azonban — időhiány miatt — nem térhetünk ki.

²¹A 37.feladatban $\psi(x) = 1$ hullámfüggvényre ezt már igazoltuk.

3.29. A bizonytalansági reláció

A koordináta és az impulzus spektruma folytonos, ezért értéküket éppen úgy, mint a klasszikus fizikában, a kvantummechanika szerint sem lehet pontosan megmérni (a pontatlanság azonban tetszőlegesen kicsi lehet). Ennek az a jótékony következménye, hogy mérés után a projekciós posztulátum alapján — mint láttuk, — mindig *normálható* állapotot kapunk, annak ellenére, hogy a folytonos spektrum sajátállapotai maguk nem normálhatók (pl. $(\vec{e}_x, \vec{e}_x) = \delta(0) = \infty$).

Ha a mérés elég pontos volt, a mérés utáni állapotban a koordináta értéke — vagy az impulzusé, ha azt mértük, — csaknem teljesen meghatározott. Természetesen a kétfajta mérés utáni állapot nem ugyanaz: koordinátamérés és impulzusmérés után különböző állapotokba „ugrik be” a tömegpont. A kérdés, amit ebben a fejezetben vizsgálunk, éppen ezzel kapcsolatos: lehet-e találni \mathcal{H}_x -ben olyan állapotot, amelyben *mind a koordináta, mind az impulzus nagysága* tetszőlegesen nagy pontossággal meg van határozva?

Intuitív válasz: A koordinátaoperátor \vec{e}_x sajátvektorai és az impulzusoperátor \vec{e}_p sajátvektorai két különböző bázist alkotnak \mathcal{H}_x -ben, amelyeknek egyetlen eleme sem közös. Ezért elég valószínűtlen, hogy található lenne \mathcal{H}_x -ben olyan vektor, amely az \vec{e}_x -k valamelyikével is, és az \vec{e}_p -k valamelyikével is „majdnem” egybeesik.

A bizonytalansági reláció ezt az intuitív választ fogalmazza meg mennyiségileg.

Legyen $\vec{\psi}$ a \mathcal{H}_x tetszőleges normált vektora. Ha a $\vec{\psi}$ állapotú részecske koordinátáját megmérjük, $|\psi(x)|^2 dx$ valószínűséggel kapunk az $(x, x + dx)$ -be eső értéket. A mérési eredmények *szórásnégyzetét* a

$$\Delta^2 \hat{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x)|^2 \cdot dx - \left[\int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x)|^2 \cdot dx \right]^2 \quad (60)$$

különbség jellemzi, ami a négyzetátlagnak (az x^2 mennyiség valószínűségi sűrűséggel súlyozott integráljának) és az átlagérték négyzetének a különbsége:

$$\Delta^2 \hat{x} = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2. \quad (61)$$

Ez a különbség annál nagyobb, *minél jobban szórnak* a mérési eredmények az átlagértékük körül. Ez különösen világos, ha $\Delta^2 \hat{x}$ -t a

$$\Delta^2 \hat{x} = \left\langle (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)^2 \right\rangle \quad (62)$$

alakban írjuk fel, amelyben $\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle$ a mért mennyiség eltérése a saját átlagától. Magának ennek a különbségnek az átlaga természetesen nulla:

$$\langle \hat{x} - \langle \hat{x} \rangle \rangle = \langle \hat{x} \rangle - \langle \langle \hat{x} \rangle \rangle = \langle \hat{x} \rangle - \langle \hat{x} \rangle = 0,$$

mert az $\langle \hat{x} \rangle$ konstans számnak (az átlagértéknek) az átlaga önmaga, és — az átlag definíciója következtében, — a pozitív és a negatív eltérések az átlagtól pont kompenzálják egymást.

Ilyen kompenzáció azonban nem lép fel az $(\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)^2$ átlagánál, ami mindig pozitív. Ezért *ennek* a mennyiségnek az átlaga — a (62) kifejezés, — valóban jellemző arra, milyen mértékben szórnak a mérési adatok az átlag körül.

A (62) azonban azonos (61)-el, ugyanis

$$\langle (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{x}^2 - 2\hat{x} \cdot \langle \hat{x} \rangle + \langle \hat{x} \rangle^2 \rangle = \langle \hat{x}^2 \rangle - 2\langle \hat{x} \rangle \cdot \langle \hat{x} \rangle + \langle \hat{x} \rangle^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2.$$

Ha a $\vec{\psi}$ állapotú részecskén koordináta helyett impulzust mérünk, akkor $|\psi(p)|^2 dp$ valószínűséggel kapunk a $(p, p + dp)$ -be eső eredményt és a mérési eredmények szórásnégyzetét a (60)-al analóg

$$\Delta^2 \hat{p} = \int_{-\infty}^{\infty} p^2 |\psi(p)|^2 \cdot dp - \left[\int_{-\infty}^{\infty} p |\psi(p)|^2 \cdot dp \right]^2 \quad (63)$$

szolgáltatta.

Lehet-e olyan $\vec{\psi}$ -t találni, amelyre $\Delta^2 \hat{x}$ és $\Delta^2 \hat{p}$ egyaránt kicsi — erre a kérdésre keressük a feleletet.

A pontos választ a *bizonytalansági reláció* adja meg a

$$\Delta \hat{x} \cdot \Delta \hat{p} \geq \frac{\hbar}{2}$$

képlet formájában, amelyben $\Delta \hat{x}$ és $\Delta \hat{p}$ a $\Delta^2 \hat{x}$ és a $\Delta^2 \hat{p}$ gyöke.

Ez a képlet a kanonikus felcserélési relációkból vezethető le, de a bizonyítás ismeretelétől eltekintünk. A bizonytalansági reláció tartalma az, hogy ha egy *tetszőleges* állapotú részecskén elvégzett koordinátamérések szórása $\Delta \hat{x}$ (ami lehet bármilyen kicsi nemnulla érték), akkor az ugyanezen állapotú részecskén végrehajtott impulzumérések eredményeinek a szórása nem lehet kisebb $\frac{\hbar}{2 \cdot \Delta \hat{x}}$ -nél: Minél kisebb $\Delta \hat{x}$, annál nagyobb $\Delta \hat{p}$ és megfordítva.

Ez a matematikai eredmény erős megkötést jelent az elképzelhető mérőberendezésekre: nem létezhet — még idealizált formában sem, — olyan mérőeszköz (mérési mód), amellyel egyidejűleg meg lehetne pontosan mérni egy részecske koordinátáját és impulzusát. A nevezetes *Bohr-Einstein vita* — amely megtalálható Bohr magyarul is megjelent tanulmánykötetében, — éppen ekörül a kérdés körül forgott. A mérőeszközöknek ebből a tulajdonságából azonban *nem* következik, hogy egy mikrorészecskének minden pillanatban van meghatározott koordinátája és impulzusa, csak éppen nem tudjuk őket egyidejűleg mindkettőt meghatározni. Ezt a lehetőséget, mint később majd részletesen diszkutáljuk, a részecskenyalábokban kimutatható interferencia cáfolja.

A klasszikus mechanikában a bizonytalansági relációhoz hasonló korlátozás egyáltalán nem létezik: az x és a p egyszerre mérhető tetszőleges (véges) pontossággal. A klasszikus mechanikai állapot fogalma pontosan ezen az együtt-mérhetőségen alapul.

57.Feladat: Határozzuk meg a $\Delta\hat{x} \cdot \Delta\hat{p}$ szorzatot a harmonikus oszcillátor $\vec{e}_{n=0}$ alapállapotában.

Megoldás: A 3.26 fejezet képleteihez kell fordulnunk. Ezek alapján

$$\int_{-\infty}^{\infty} x|e_{n=0}(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} p|e_{n=0}(p)|^2 dp = 0,$$

ezért

$$\Delta^2\hat{x} = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx = C^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi \quad \left(\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x\right).$$

$$\Delta^2\hat{p} = C'^2 \int_{-\infty}^{\infty} p^2 e^{-\frac{p^2}{\hbar m\omega}} dp = C'^2 (\hbar m\omega)^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \eta^2 e^{-\eta^2} d\eta \quad \left(\eta = \frac{p}{\sqrt{\hbar m\omega}}\right).$$

A ξ és az η integrál értéke $\sqrt{\pi}/2$, ezért

$$\Delta^2\hat{x} \cdot \Delta^2\hat{p} = C^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2} C'^2 (\hbar m\omega)^{3/2} \cdot \frac{\pi}{4} = \frac{\hbar^2}{4},$$

$$\Delta\hat{x} \cdot \Delta\hat{p} = \frac{\hbar}{2}.$$

A „bizonytalansági szorzat” értéke ebben az esetben a bizonytalansági reláció által megengedett legkisebb érték. ♣

Érdekes összefüggés van a zéruspont-energia és a bizonytalansági reláció között. Vegyük a harmonikus oszcillátor

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2$$

Hamilton operátorát, tegyük úgy, mintha nem tudnánk, hogy $E_{min} = \frac{1}{2}\hbar\omega$ és kérdezzük meg, mekkora a \hat{H} legkisebb E_{min} sajátértéke, amely összefér a bizonytalansági relációval.

Legyen az oszcillátor a keresett E_{min} -hez tartozó sajátállapotban. Akkor az energiának nincs szórása, ezért

$$\langle\hat{H}\rangle = \frac{1}{2m}\langle\hat{p}^2\rangle + \frac{m\omega^2}{2}\langle\hat{x}^2\rangle = E_{min}.$$

Mivel a koordináta és az impulzus átlaga nulla, ezt a képletet átírhatjuk az

$$E_{min} = \frac{1}{2m}\Delta^2\hat{p} + \frac{m\omega^2}{2}\Delta^2\hat{x}$$

alakba. Ha bevezetjük az

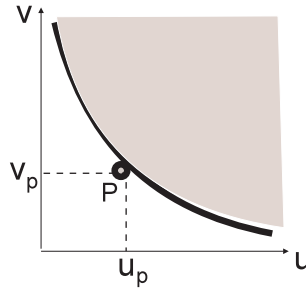
$$u = \sqrt{\frac{1}{2m}} \Delta \hat{p} \quad v = \sqrt{\frac{m\omega^2}{2}} \Delta \hat{x}$$

jelölést, akkor ez a képlet

$$E_{min} = u^2 + v^2$$

lesz, a bizonytalansági reláció pedig

$$u \cdot v = \sqrt{\frac{m\omega^2}{2}} \cdot \sqrt{\frac{1}{2m}} \cdot \Delta \hat{x} \cdot \Delta \hat{p} \geq \frac{\omega \hbar}{4}.$$



7. ábra.

Az u, v sík 1.negyedében ez az egyenlőtlenség az $uv = \frac{\omega \hbar}{4}$ hiperbola által határolt tartomány pontjait engedi meg (az ábrán a pontozott terület). Ebben a megengedett tartományban az E_{min} abban a P pontban lesz a lehető legkisebb, amely az origóhoz legközelebb van. A P koordinátái $(u_P, v_P) = \left(\frac{\sqrt{\omega \hbar}}{2}, \frac{\sqrt{\omega \hbar}}{2} \right)$, tehát

$E_{min} = u_P^2 + v_P^2 = \frac{\omega \hbar}{2}$, ami az E_0 zéruspontenergiával (az oszcillátor tényleges alapállapot energiájával) egyenlő.

Eszerint a gondolatmenet szerint az alapállapot energiája azért nem lehet nulla, mert ez ellentétben lenne a bizonytalansági relációval. Az oszcillátornál az alapállapot energiája a legkisebb olyan energia, ami a bizonytalansági relációval összefér.

A fejezet szempontjából mellékes, mégis érdekes tény, hogy a kvantummechanikai oszcillátor alapállapotában a kinetikus és a potenciális energia várható értéke (az u_P^2 és a v_P^2) éppúgy megegyezik egymással, mint a klasszikus oszcillátornál (Mechanika jegyzet 60.feladat).

58.Feladat: Számítsuk ki $\Delta \hat{x}$ -t és $\Delta \hat{p}$ -t a 38.feladat $\vec{\varphi}$ állapotára.

Megoldás: Mindenekelőtt megjegyezzük, hogy a feladat megoldásában bevezetett Δp *nem azonos* a bizonytalansági relációban fellépő $\Delta \hat{p}$ -vel, amely (63) alapján számítható ki:

$$\Delta^2 \hat{p} = \frac{1}{\Delta p} \int_{p_1}^{p_2} p^2 \cdot dp - \left[\frac{1}{\Delta p} \int_{p_1}^{p_2} p \cdot dp \right]^2.$$

Ebben a képletben

$$\frac{1}{\Delta p} \int_{p_1}^{p_2} p \cdot dp = \frac{1}{\Delta p} \cdot \frac{1}{2} (p_2^2 - p_1^2) = \frac{1}{2} (p_1 + p_2) \equiv \bar{p},$$

$$\frac{1}{\Delta p} \int_{p_1}^{p_2} p^2 \cdot dp = \frac{1}{\Delta p} \int_{\bar{p}-\frac{1}{2}\Delta p}^{\bar{p}+\frac{1}{2}\Delta p} p^2 \cdot dp = \frac{1}{3 \cdot \Delta p} \left(3\bar{p}^2 \cdot \Delta p + \frac{1}{4} \Delta p^3 \right) = \bar{p}^2 + \frac{1}{12} \Delta p^2,$$

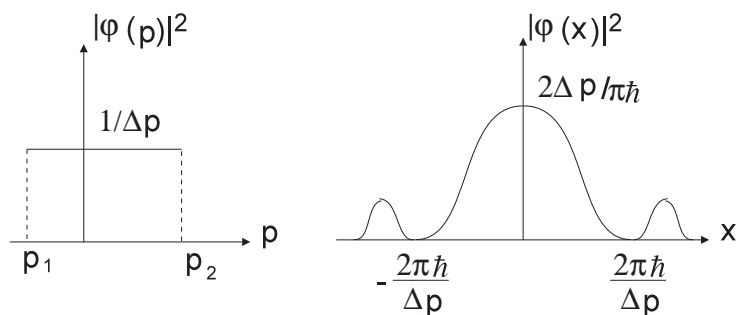
ezért

$$\Delta^2 \hat{p} = \frac{1}{12} \Delta p^2 \quad \Delta \hat{p} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \Delta p.$$

A bizonytalansági relációban szereplő másik tényezőt (60) adja meg, amelybe természetesen $\psi(x)$ helyébe a 38.feladat $\varphi(x)$ hullámfüggvénye irandó. A feladatban a hullámfüggvény utolsóként felírt alakjából látható, hogy

$$x^2 |\varphi(x)|^2 = \text{konstans} \cdot \sin^2 \left(\frac{x \cdot \Delta p}{2\hbar} \right),$$

amelynek integrálja az egész x -tengelyre nyilván végtelen. Ezért $\Delta \hat{x} = \infty$, és a φ -re vonatkozó bizonytalansági reláció — a harmonikus oszcillátor alapállapotával ellentétben, — a minimálisan szükségesnél "végtelenszer" jobban teljesül: $\Delta \hat{x} \cdot \Delta \hat{p} = \infty \gg \hbar/2$. ♣



8. ábra.

A bizonytalansági reláció fontos szerepet játszott a kvantumelmélet kialakulásában. Sokan hitték úgy, hogy a bizonytalansági reláció a mikrofizikának az az alapelve, amelyből a kvantumelmélet minden lényeges következménye lezármasztatható. Ma már tudjuk, hogy ez nem így van. A bizonytalansági reláció egyike a Heisenberg-féle kanonikus felcserélési összefüggés következményeinek és ez a viszony nem fordítható meg: a kanonikus felcserélési reláció nem vezethető le a bizonytalansági relációból.

A bizonytalansági reláció a koordinátára és az impulzusra vonatkozóan fejezi ki annak az általános elvnek egy speciális következményét, hogy csak azoknak a fizikai mennyiségeknek lehet egyszerre határozott értékük, amelyeknek az operátorai kommutálnak egymással. A mérési adatok *szórásának* a szemszögéből fogalmazzuk ezt meg. A statisztikus szórás azonban többnyire nem jellemzi elég érzékenyen (finoman) a nemkommutáló operátorokhoz tartozó fizikai mennyiségek kapcsolatát. Az 58. feladatban pl. a „bizonytalansági szorzat” értéke végtelen és ezért a bizonytalansági relációból magából nem vonhatjuk le azt a következtetést, hogy minél határozottabb értéke van p -nek a $\vec{\psi}$ állapotban (azaz minél kisebb az Δp), annál bizonytalanabb a koordináta értéke. Ebben példában ugyanis a koordináta szórása minden Δp -nél egyformán végtelen. A $|\phi(x)|^2$ és a $|\phi(p)|^2$ *függvényalakja* (8. ábra) azonban határozottan mutatja ezt a kapcsolatot: az Δp csökkenésével a $|\varphi(x)|^2$ görbe centrális csúcsának a $\frac{4\pi\hbar}{\Delta p}$ szélessége nő. A szórás azonban nem elég érzékeny mutatója a valószínűségi eloszlásnak ahhoz, hogy ezt minden esetben egyértelműen jelezze. A harmonikus oszcillátor esetében ugyanakkor — mint láttuk, — a bizonytalansági reláció értékes betekintést tesz lehetővé a zéruspont energia eredetébe.

3.30. A dinamikai egyenlet

Mindeddig nem esett szó dinamikáról, vagyis arról, hogy a tömegpont állapotát jellemző állapotvektor az időben mindig változik: $\vec{\psi} = \vec{\psi}(t)$. A dinamikai egyenlet az időbeli változást határozza meg. Arra kell választ adnia, hogyan számíthatjuk ki a $(t + dt)$ pillanatbeli $\vec{\psi}(t + dt)$ -t a t pillanatbeli $\vec{\psi}(t)$ alapján.

Logikus feltenni, hogy a $\vec{\psi}(t + dt) - \vec{\psi}(t)$ különbség arányos dt -vel, vagyis annál kisebb, minél rövidebb a dt idő:

$$\vec{\psi}(t + dt) - \vec{\psi}(t) = O(\vec{\psi}(t)) \cdot dt.$$

A jobboldalon O egy egyenlőre tetszőleges operátor, amely a t -beli $\vec{\psi}(t)$ állapotra hat és a rendszerre jellemző operátornak kell lennie (függenie kell attól, hogy szabad tömegpontról, harmonikus oszcillátorról vagy egyéb dinamikai rendszerről van-e szó).

A fenti képlet felírásakor nem tettük fel, hogy O lineáris operátor, de ezt a feltevést most megtesszük. Így

$$\vec{\psi}(t + dt) - \vec{\psi}(t) = \hat{O}\vec{\psi}(t) \cdot dt.$$

A linearitásnak az a következménye, hogy egy lineárkombinációval előállított $\vec{\psi}$ időbeli változását a lineárkombináció elemeinek az időbeli változása határozza meg. Ez a tulajdonság jól használható az egyenletmegoldásánál (ld. a következő fejezetet).

Meg kell követelnünk, hogy a dinamikai egyenlet őrizze az állapot normáját, hiszen a Born-hipotézis szerint csak 1-re normált vektorok adnak helyesen normált valószínűséget. Matematikailag ez a követelmény a $d(\vec{\psi}(t), \vec{\psi}(t)) = 0$ feltétellel fogalmazható meg. Részletesen kiírva ez a feltétel a következő:

$$\begin{aligned} d(\vec{\psi}(t), \vec{\psi}(t)) &\equiv (\vec{\psi}(t+dt), \vec{\psi}(t+dt)) - (\vec{\psi}(t), \vec{\psi}(t)) = \\ &= (\hat{O}\vec{\psi}(t), \vec{\psi}(t)) \cdot dt + (\vec{\psi}(t), \hat{O}\vec{\psi}(t)) \cdot dt + o(dt^2) = 0. \end{aligned}$$

Ez akkor teljesül azonosan, ha \hat{O} hermitikus adjungálásnál előjelet vált (antihermitikus): ekkor ugyanis a jobboldal lényeges (dt -vel arányos) tagjai kiejtik egymást.

Antihermitikus operátorra már láttunk példát (a deriválás ilyen) és tudjuk, hogy ha $1/i$ -t leválasztunk róla, hermitikus operátor marad vissza;

$$\hat{O} = \frac{1}{i} \hat{K} \quad (\hat{K} \text{ hermitikus}).$$

Hogyan válasszuk meg \hat{K} -t?

A stacionér állapot fogalma a Bohr-modelltől kezdve (3.6 fejezet) fontos eleme a tárgyalásunknak. Sugárzásnál ezek között az állapotok között történik átugrás, és — mint már hangsúlyoztuk (a 3.10 fejezet végén), — mindaddig, amíg az elektromágneses mezőt nem vesszük explicite figyelembe, ezek az állapotok *stabilak*. A harmonikus oszcillátor kvantummechanikai tárgyalása mutatja (3.25 fejezet), hogy a stacionér állapotok a Hamilton-operátor sajátállapotai.

Mindennek alapján logikus megkövetelni: a \hat{K} legyen olyan, hogy a Hamilton-operátor sajátállapotai időben ne változzanak.

Ez, mint mindjárt látni fogjuk, teljesül, ha $\hat{K} = konstans \times \hat{H}$. A konstansnak $J^{-1} \cdot s^{-1}$ dimenziójúnak kell lennie, ami éppen a Planck-állandó dimenziójának az inverze (1.1 fejezet). Ezért — mivel fundamentális egyenletről van szó, — logikus feltenni, hogy a konstans értéke éppen $1/\hbar$. Így

$$\vec{\psi}(t+dt) - \vec{\psi}(t) = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \vec{\psi}(t) \cdot dt,$$

azaz

$$i\hbar \frac{d\vec{\psi}(t)}{dt} = \hat{H} \vec{\psi}(t). \quad (64)$$

Ez a kvantummechanika alapvető dinamikai egyenletének a Schrödinger által felfedezett alakja, amelyet *időtől függő Schrödinger-egyenletnek* neveznek.

Megmutatjuk, hogy a stacionér állapotokat ez az egyenlet időben valóban nem változtatja. Legyen \vec{e} a \hat{H} operátor E sajátértékhez tartozó sajátvektora: $\hat{H}\vec{e} = E\vec{e}$.

A (64)-be történt behelyettesítés mutatja, hogy ennek a sajátérték egyenletnek a következtében $e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \cdot \vec{e}$ kielégíti a (64) dinamikai egyenletet:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \cdot \vec{e} \right) = i\hbar \cdot \left(-\frac{i}{\hbar}E \right) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \cdot \vec{e} = E e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \cdot \vec{e} = \hat{H} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \cdot \vec{e} \right).$$

Ez a megoldás azonban minden t -ben csupán az $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ fázisfaktorban különbözik \vec{e} -től és ezért ugyanazt a fizikai állapotot reprezentálja, mint \vec{e} (ld. a 47.feladatot).

59.Feladat: Egy tömegpont az x -tengely mentén mozog olyan erő hatása alatt, amelynek erőfüggvénye $U(x)$. Írjuk fel az időfüggő Schrödinger egyenletet koordináta-representációban.

Megoldás:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x,t). \quad (65)$$

Megjegyzés: (64)-ben az egyetlen változó a t idő volt, ezért nem volt szükség a parciális deriválás fogalmára. Koordináta reprezentációban azonban jelölni kell, hogy a t -szerinti deriválásnál x -t, az x -szerintinél t -t konstansnak kell tekinteni.♣

A klasszikus mechanikában az állapot időbeli változását a Hamilton-egyenletek írják le (Mechanika jegyzet (110) képlet). A Hamilton-egyenletek és az időfüggő Schrödinger-egyenlet közös vonása, hogy időben első rendű diff. egyenletek és a Hamilton-függvény ill. a Hamilton-operátor szerepel bennük. Azonban a dinamikai egyenlet Heisenberg által felfedezett formája teszi igazán világossá a kvantumelmélet és a klasszikus mechanika dinamikai egyenletei között a szoros strukturális hasonlóságot, amiben a korrespondencia-elv fejeződik ki. A kvantummechanikának ezt a formáját azonban időhiány miatt nem tárgyaljuk.

3.31. A dinamikai egyenlet általános megoldása

Ha ismertnek tételezzük fel a Hamilton-operátor sajátvektorait és sajátértékeit és megelégszünk azzal, hogy a megoldást végtelen sor alakjában kapjuk meg, akkor az időfüggő Schrödinger egyenletet meg tudjuk oldani általános formában.

Tegyük fel, hogy a Hamilton operátor spektruma diszkrét:

$$\hat{H}\vec{e}_n = E_n\vec{e}_n,$$

és keressük (64)-nek azt a $\vec{\psi}(t)$ megoldását, amely $t = 0$ -ban a megadott $\vec{\psi}(0) = \vec{\varphi}$ -vel egyenlő.

Állítsuk elő $\vec{\psi}(0)$ -t az \vec{e}_n -k lineárkombinációjaként:

$$\vec{\psi}(0) = \sum_n \varphi_n \vec{e}_n. \quad (66)$$

Az előző fejezetben láttuk, hogy az egyes energia sajátvektorok időbeli változását az energia értékétől függő fázisfaktor fejezi ki:

$$\vec{e}_n(t) = e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \vec{e}_n.$$

A dinamikai egyenlet lineáris, ezért érvényes rá a szuperpozíció elve: ha $\vec{\psi}_1(t)$ és $\vec{\psi}_2(t)$ megoldása a dinamikai egyenletnek, akkor az $\alpha\vec{\psi}_1(t) + \beta\vec{\psi}_2(t)$ lineárkombináció is megoldás. Ennek az a következménye, hogy a (66) *összeg* időbeli változását a *tagok* időbeli változása határozza meg:

$$\vec{\psi}(t) = \sum_n \varphi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \vec{e}_n. \quad (67)$$

Ez az egyenlet a (64) általános megoldása, amelynek helyessége behelyettesítéssel is igazolható.

Amikor \hat{H} spektruma folytonos, az n -szerinti összeget integrálás helyettesíti.

Látjuk, hogy az energia-sajátérték egyenlet megoldása az időfüggő Schrödinger egyenlet megoldásának a kulcsa, a két probléma között a kapcsolat nagyon szoros. Az energia-sajátérték egyenletet is Schrödinger vezette be a kvantummechanikába, ezért *Schrödinger-egyenletnek* nevezzük, természetesen az „időfüggő” jelző nélkül.

Az előző fejezetben, a dinamikai egyenlet konkrét alakjának a motiválásánál hangsúlyoztuk, hogy az energia-sajátvektorok egy időfüggő *fázisfaktoron* keresztül függenek az időtől és ezért végig ugyanazt a fizikai állapotot reprezentálják: időfüggsük csak látszólagos.

Az időfüggés azonban nagyon is valóságossá válik, amikor nem pont energia-sajátvektorról van szó, hanem ezek lineárkombinációjáról. A (67) mutatja, hogy a lineárkombináció minden tagja más és más fázisfaktoral szorzódik, ezért az *összeg* időfüggése már nem egy fázisfaktorban jelentkezik, hanem annál sokkal bonyolultabb: egy általános állapotvektor ténylegesen változtatja az irányát a Hilbert-térben.

60.Feladat: Legyen a lineáris harmonikus oszcillátor állapotvektora $t = 0$ -ban $\vec{\psi}(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_{n=0} + \vec{e}_{n=1})$. Mi a $w(x, t)dx$ valószínűsége annak, hogy ha a t pillanatban megmérjük a tömegpont helyét, az $(x, x + dx)$ intervallumban találjuk?

Megoldás:

$$\vec{\psi}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t} \vec{e}_{n=0} + e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} \vec{e}_{n=1} \right) = e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\vec{e}_{n=0} + e^{-i\frac{(E_1-E_0)}{\hbar}t} \vec{e}_{n=1} \right).$$

Az $1/\sqrt{2}$ faktor miatt $\vec{\psi}$ 1-re normált, ezért

$$w(x, t) = \left| \langle \vec{e}_x, \vec{\psi}(t) \rangle \right|^2 = \frac{1}{2} (|e_{n=0}(x)|^2 + |e_{n=1}(x)|^2 + 2|e_{n=0}(x)| \cdot |e_{n=1}(x)| \cdot \cos \left(\frac{E_1 - E_0}{\hbar} t + \alpha \right)),$$

amelyben az α szöveget az

$$e_{n=0}(x)e_{n=1}^*(x) = |e_{n=0}(x)| \cdot |e_{n=1}(x)| \cdot e^{i\alpha}$$

képlet definiálja. A harmonikus oszcillátor energiasajátfüggvényei azonban valósak, ezért $\alpha = 0$, az $E_1 - E_0$ energiakülönbség pedig $\hbar\omega$. Ezért

$$w(x, t) = \frac{1}{2} (e_{n=0}(x)^2 + e_{n=1}(x)^2 + 2e_{n=0}(x) \cdot e_{n=1}(x) \cdot \cos \omega t).$$

Mint látjuk, azokban a pontokban, amelyekben sem $e_0(x)$ sem $e_1(x)$ nem nulla, a találati valószínűség ω frekvenciával oszcillál. Ezt a típusú oszcillációt speciális kísérletben ki lehet mutatni.♣

3.32. A de Broglie hullámok

A szabad mozgás (3.24 fejezet) Schrödinger-egyenlete a a kinetikus energia operátorának a sajátértékegyenlete:

$$\frac{1}{2m} \hat{p}^2 \vec{e}_p = E_p \vec{e}_p.$$

Az egyenletet az impulzusoperátor \vec{e}_p sajátvektorai elégítik ki, az \vec{e}_p -hez tartozó sajátérték az $E_p = \frac{p^2}{2m}$ kinetikus energia.

Keressük most az időtől függő Schrödinger-egyenletnek azt az $\vec{e}_p(t)$ megoldását, amely $t = 0$ -ban egybeesik \vec{e}_p -vel: $\vec{e}_p(0) = \vec{e}_p$. Az előző fejezet alapján

$$\vec{e}_p(t) = e^{-i\omega_p t} \vec{e}_p,$$

ahol $\omega_p = \frac{E_p}{\hbar}$.

Írjuk fel ennek az időben változó vektornak a hullámfüggvényét koordináta reprezentációban:

$$e_p(x, t) = e^{-i\omega_p t} e_p(x) \stackrel{(40)}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i(k_p x - \omega_p t)}, \quad (68)$$

amelyben $k_p = \frac{p}{\hbar}$. Ez a függvény természetesen kielégíti a szabad mozgás

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} \quad (69)$$

időtől függő Schrödinger-egyenletét.

Az $e_p(x, t)$ függvény megegyezik az egydimenziós (az x tengely mentén terjedő) monokromatikus síkhullám függvényalakjával (Elektrodinamika-jegyzet (127) képlet), azonban nem lehet fizikai állapot hullámfüggvénye, mert az $\vec{e}_p(t)$ állapot nem normálható: $(\vec{e}_p(t), \vec{e}_p(t)) = (\vec{e}_p, \vec{e}_p) = \delta(0) = \infty$. De a 3.28 fejezetben (és a 38.feladatban) láttuk, hogy ha ezekből a vektorokból elkészítjük a

$$\vec{\psi}(t) = N \int_{p_1}^{p_2} dp \cdot A(p) \cdot \vec{e}_p(t)$$

szuperpozíciót, amelyben $A(p)$ tetszőleges függvény és $N = \left[\int_{p_1}^{p_2} dp \cdot |A(p)|^2 \right]^{-1/2}$, akkor ez a vektor már normált, akármilyen szűk is a (p_1, p_2) intervallum. Ennek a vektornak a hullámfüggvénye a

$$\psi(x, t) = N \int_{p_1}^{p_2} dp \cdot A(p) e_p(x, t) = N \int_{p_1}^{p_2} dp \cdot A(p) e^{i(k_p x - \omega_p t)} \quad (70)$$

hullámcsomag (Elektrodinamika jegyzet 2.30 fejezet), amelynek x -beli mérete a bizonytalansági reláció alapján $\frac{\hbar}{p_2 - p_1}$ körüli vagy nagyobb. Ez a hullámcsomag — amelyet *de Broglie hullámnak* neveznek, — a

$$v_g = \left(\frac{dk_p(\omega_p)}{d\omega_p} \right)^{-1} = \frac{d\omega_p}{dk_p} = \frac{dE_p}{dp} = \frac{d}{dp} \left(\frac{p^2}{2m} \right) = \frac{p}{m}$$

csoportsebességgel terjed (Elektrodinamika jegyzet (146) képlet), ami megegyezik egy E_p kinetikus energiájú tömegpont *mechanikai értelemben vett mozgási sebességével* (a csoportsebességre vonatkozó képletekben p a szűk (p_1, p_2) intervallum közepes impulzusa).

A szabad tömegpont hullámfüggvénye tehát egy p közepes impulzusú hullámcsomag, amely p/m sebességgel mozog. A szabad részecskékkel kapcsolatos fizikai problémák túlnyomó többsége olyan, hogy a megoldásuk *nem érzékeny* a hullámcsomag alakját meghatározó $A(p)$ amplitúdó-függvényre — amelyet általában nem is ismerünk, — és csak a p közepes impulzus értékétől függ (maga a terjedési sebesség is ilyen tulajdonságú). Ezért szokásossá vált a p impulzusú szabad részecske hullámfüggvényén az (68) síkhullámot érteni és csak akkor fordítani figyelmet a hullámcsomag jellegre, amikor ez lényeges. Ezt a szokást mi is követni fogjuk.

Ennek a megállapodásnak a szellemében tehát mondhatjuk, hogy a szabad részecske hullámfüggvénye síkhullám, amelynek frekvenciáját és a hullámvektorát a részecske impulzusa határozza meg az²² $\omega = \frac{E}{\hbar}$ képlet és a $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ de Broglie formula alapján. Ez volt az első ismert hullámfüggvény és ez magyarázza magát a „hullámfüggvény” elnevezést. A részecskék hullámtermészete interferenciakísérletben egyértelműen demonstrálható, de ezeket a fundamentális jelentőségű kísérleteket majd akkor tárgyaljuk, amikor már nem korlátozódunk egyetlen térbeli dimenzióra.

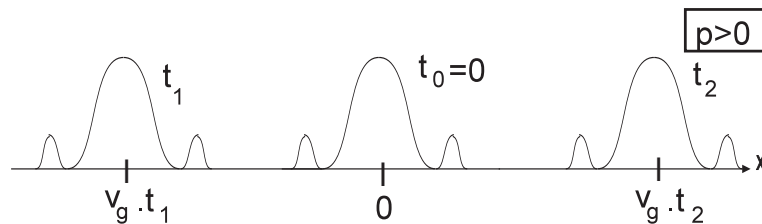
61.Feladat: Legyen $\psi(x, t)$ de Broglie hullám(csomag), amelynek (közepes) impulzusa p és $A(p) = 1$. Vázoljuk fel a találati valószínűség eloszlását a $t_0 = 0$, a $t_1 < 0$, és a $t_2 > 0$ pillanatban.

Megoldás: Három tiszta állapotú anszamblot képzelünk el, amelyekben a részecskék hullámfüggvénye $\psi(x, 0)$, $\psi(x, t_1)$ és $\psi(x, t_2)$. Az egyes anszamblokba tartozó részecskéken végzett mérésekben a valószínűségi eloszlás $w_i(x) = |\psi(x, t_i)|^2$ ($i = 0, 1, 2$).

A valószínűségi eloszlásokat a 9.ábrán vázoltuk fel. Mindegyik egy széles csúcs, amelyeknek az x -irányú mérete megegyezik a hullámcsomagok térbeli kiterjedésével. A $w_0(x)$ maximuma az origóban van. A $|\psi(x, 0)|^2$ -t a 38.feladatból lehet leolvasni:

$$|\psi(x, 0)|^2 = \frac{\Delta p}{2\pi\hbar} \left(\frac{\sin \frac{x\Delta p}{2\hbar}}{\frac{x\Delta p}{2\hbar}} \right)^2.$$

A másik két csúcs maximuma $v_g \cdot |t_1|$ és $v_g \cdot |t_2|$ távolságra van az origótól. Amikor $p > 0$, a csomag pozitív irányban mozog, ezért a $w_1(x)$ csúcsa a negatív, a $w_2(x)$ -é a pozitív féltengelyen van. $p < 0$ -nál a helyzet fordított♣.



9. ábra.

Megjegyzés: Hullámcsomagok mozgásával a továbbiakban még találkozunk, ezért röviden külön is összefoglaljuk a legfontosabb tudnivalókat:

²²A továbbiakban a kinetikus energiáról, a körfrekvenciáról és a hullámvektorról elhagyjuk a p indexet.

Általában célszerű feltenni, hogy a hullámcsomag hullámfüggvénye $t = 0$ -ban a 38.feladatban tárgyalt $\varphi(x)$ -el egyenlő. A csomag (maximuma) ekkor $x = 0$ -ban van.

Tetszőleges t -ben a $\varphi(x)$ -t kifejező integrálba még be kell írni az $e^{-\frac{E}{\hbar}t}$ tényezőt, amelynek következtében a t pillanatban a csomag (maximuma) az $x = v_g t$ pontba kerül.

Mint láttuk, egy szabadon mozgó tömegpont hullámfüggvénye matematikai szempontból ugyanolyan függvény (hullám), mint a szabadon terjedő elektromágneses mezőben az \vec{E} vagy a \vec{H} komponensei. A kétfajta hullám fizikai jelentése azonban teljesen különböző.

Az elektromágneses hullámban terjedő \vec{E} -nek ugyanaz a fizikai jelentése, mint — mondjuk — a ponttöltést körülvevő elektromos mezőé, és a \vec{H} -nak ugyanaz, mint pl. a vezetőt körülölelő mágneses téré. Ha a hullám útjában próbatöltéseket helyezünk el, a próbatöltésre ható Coulomb-erő egyenlő lesz az adott pillanatban az egyes próbatöltések helyén lévő elektromos mezőnek és a próbatöltés nagyságának a szorzatával. Ezzel a módszerrel — elvben — „letapogatható” a hullám elektromos komponensének az alakja egyetlen hullámcsomag esetén is. *Az azonos függvényalakú hullámok szigorúan azonos fizikai hatást váltanak ki.*

A de Broglie hullám ezzel szemben a tömegpont találati valószínűségét határozza meg. Csak a hullámcsomagok tiszta állapotú *anszamlja* segítségével lehet a hullámcsomag alakját „letapogatni”. Az anszaml minden egyes eleme egyetlen értékelhető adattal járul hozzá a valószínűségi eloszlás görbéjéhez, amelyből végül is kirajzolódik a találati valószínűség eloszlása. *Az azonos függvényalakú hullámok általában különböző fizikai hatást váltanak ki:* a hullámcsomag kiterjedésén belül a részecskét mindig más és más pontban észleljük.

További különbség, hogy az elektromágneses hullámoknál a komplex alak csak matematikai segédeszköz: csak a valós résznek van fizikai jelentése. Amikor pl. a hullám elektromos terének a hatását akarjuk egy ponttöltésre kiszámítani, az \vec{E} komponenseinek a valós részét kell behelyettesíteni a Coulomb-erő képletébe.

Egy hullámfüggvénynek ezzel szemben lényeges tulajdonsága az, hogy komplex. Amikor a találati valószínűségeket számoljuk, a hullámfüggvényt *egészben* kell behelyettesíteni a megfelelő skalárszorzatba.

3.33. A Schrödinger-egyenlet megoldására kirótt feltételek

Az energiasajátérték probléma megoldásának legfontosabb eszköze a Schrödinger-egyenlet koordinátareprezentációban felírt formája²³:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E \cdot \psi(x). \quad (71)$$

Az egyenletben az E sajátérték és a hozzá tartozó $\psi(x)$ sajátfüggvény az ismeretlen. A sajátfüggvényeknek *normálható* — vagy *delta-függvényre normálható* — *folytonos függvényeknek* kell lenniük. Csak azok az E -k tartoznak az energiaspektrumba, amelyekhez található az (71)-nek ezekkel a tulajdonságokkal rendelkező megoldása.

A normálhatóság eldöntése egyszerű: a $\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot |\psi(x)|^2$ integrálnak végesnek kell lennie. Látni fogjuk, hogy a spektrumnak az a része, amelyhez normálható sajátfüggvények tartoznak, diszkrét²⁴. A diszkrét spektrumhoz tartozó energiáknál *a tömegpont kötve van a potenciálban* (a mozgás *korlátos*), a hullámfüggvénynek $x \rightarrow \pm\infty$ -nél el kell tűnnie (hiszen korlátos mozgásnál a találati valószínűségnek a végtelen felé közeledve nullához kell tartania). Ez a követelmény azonban *csak bizonyos E értékek mellett teljesíthető*: a (71) Schrödinger-egyenlet ezen a módon "éri el" az energia kvantáltságát, amelyről a kvantummechanika a nevét kapta. Érdekes, hogy már a klasszikus mechanikai tárgyalás alapján is meg lehet állapítani, milyen energiatartomány az, amelyben az energiaspektrum diszkrét (maguk a diszkrét energiaértékek természetesen csak a Schrödinger-egyenlet alapján számíthatók ki).

Abban az energiatartományban viszont, amelyben a klasszikus mozgás nem korlátos (*végtelen*, legalább az egyik irányban), a Schrödinger-egyenlet minden energiát megenged (folytonos spektrum). A folytonos spektrumhoz tartozó energia sajátfüggvények deltára-normálhatók. A deltára-normáltság kritériuma az, hogy az $x \rightarrow \pm\infty$ asszimptotikus tartományok legalább egyikében $\psi(x)$ legyen $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x}$ alakú, azaz egyezzen meg a p -impulzusú szabad tömegpont hullámfüggvényével (a képletben a végtelen távoli mozgás impulzusa szerepel, amely $|p| = \sqrt{2m(E - U(\pm\infty))}$ ²⁵). Ez utóbbi függvényekről ugyanis tudjuk, hogy deltára normáltak (3.23 fejezet), és megmutatható, hogy ez elegendő a $\psi(x)$ -k deltára-normálhatóságához is.

Azok az E -k, amikhez tartozó $|\psi(x)|$ a végtelenhez tartva növekszik még deltára sem normálhatók, ezért nem tartoznak az energiaspektrumba. Ilyen energiák a megfelelő klasszikus mozgásban sem fordulnak elő.

A következő fejezetekben olyan potenciálokkal is fogunk dolgozni, amelyek nem folytonosak, hanem valamilyen $x = a$ pontban „ugranak”: $U(a-0) \neq U(a+0)$. A sa-

²³ A harmonikus oszcillátor energiáit és sajátfüggvényeit a 25-26. fejezetben a Schrödinger egyenlet nélkül találtuk meg, de ezt a Hamilton-operátor speciális alakja tette lehetővé.

²⁴ Ezzel az esettel találkoztunk a harmonikus oszcillátornál.

²⁵ Gyakran $U(\pm\infty) = 0$, de ez nem kötelező.

játfüggvényeknek ebben az $x = a$ pontban is folytonosnak kell lenniük, sőt, belátható, hogy $\frac{d\psi}{dx}$ deriváltjuk is folytonos ebben a pontban.

Valóban, integráljuk (71)-t tagonként az $(a - \Delta a) < x < (a + \Delta a)$ intervallumra. Ezt kapjuk:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{d\psi}{dx} \right)_{x=a+\Delta a} - \left(\frac{d\psi}{dx} \right)_{x=a-\Delta a} \right] = \int_{a-\Delta a}^{a+\Delta a} dx \cdot (E - U(x))\psi(x).$$

Ha a jobboldalon az integrandus az integrációs tartományban véges (nem kell folytonosnak lennie!), azaz ha U véges, akkor $\Delta a \rightarrow 0$ -nál a jobboldal zérushoz tart, tehát

$$\left(\frac{d\psi}{dx} \right)_{x=a+0} = \left(\frac{d\psi}{dx} \right)_{x=a-0},$$

ahogy állítottuk. Amikor azonban U az $x = a$ -ban végtelen nagyot ugrik, ez a konklúzió érvénytelen és a hullámfüggvény deriváltjának lehet szakadása (a hullámfüggvénynek lehet „törése”).

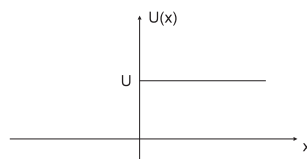
3.34. A potenciállépcső ($E > U$)

Potenciállépcsőnek az

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ U = \text{konstans} & x > 0 \end{cases} \quad (72)$$

potenciálugrást nevezük, amelyhez a következő Schrödinger-egyenlet tartozik:

$$\begin{aligned} \psi'' + k^2\psi &= 0 & (x < 0) \\ \psi'' + k_1^2\psi &= 0 & (x > 0). \end{aligned}$$



10. ábra.

Vesszővel az x -szerinti deriválást jelöljük, és bevezettük a

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad k_1^2 = \frac{2m(E - U)}{\hbar^2}$$

jelöléseket. Azért használunk *négyzeteket*, mert a spektrumnak arra a részére korlátozódunk, amikor mind az E , mind az $E - U$ pozitív. *Ebben a fejezetben* azonban az U maga lehet negatív is.

Behelyettesítéssel ellenőrizhető, hogy a Schrödinger-egyenlet általános megoldása a következő:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Ce^{-ikx} & (x < 0) \\ Be^{-ik_1x} + De^{ik_1x} & (x > 0), \end{cases} \quad (73)$$

amelyben A, B, C, D konstansok, és $k, k_1 \geq 0$.

A konstansokat abból a feltételből kell megválasztani, hogy ψ és ψ' az $x = 0$ -ban legyen folytonos. Ez azonban csak két feltétel, ezért a konstansok közül csak kettőt határoz meg.

A megfelelő klasszikus feladatban az adott E -hez két eset tartozik: az elsőben a tömegpont balról jobbra mozog, a másodikban ellenkező irányban. Az első esetben az $x < 0$ tartományban az impulzusa $p = \sqrt{2mE} = \hbar k$, az $x > 0$ -ban $p_1 = \sqrt{2m(E-U)} = \hbar k_1 \neq p$. A második esetben az impulzusok nagysága ugyanennyi, csak az előjelük negatív. A tömegpont mindkét esetben a végtelenből érkezik és a végtelenbe távozik, ezért a (73) sajátfüggvények deltára-normálhatók. *Fizikai állapottot* — a már ismert módon — úgy hozunk létre, hogy a $(p - \frac{1}{2}\Delta p \equiv p_1, p + \frac{1}{2}\Delta p \equiv p_2)$ tetszőlegesen szűk tartományra ($p = \sqrt{2mE}$) integrálva 1-re normált vektort képzünk belőlük.

A hullámfüggvények időfüggését is figyelembe véve a következő normálható állapotot kapjuk:

$$\psi(x, t) = \begin{cases} A \int_{p_1}^{p_2} dp \cdot e^{i(kx - \omega t)} + C \int_{p_1}^{p_2} dp \cdot e^{i(-kx - \omega t)} & (x < 0) \\ B \int_{p_1}^{p_2} dp \cdot e^{i(-k_1x - \omega t)} + D \int_{p_1}^{p_2} dp \cdot e^{i(k_1x - \omega t)} & (x > 0), \end{cases} \quad (74)$$

ahol $\omega = E/\hbar$.

A jobboldalon mind a négy integrál egy-egy hullámcsomag, amelyeknek a maximuma $t = 0$ -ban az origóban van (32.fejezet). A terjedési irányokat figyelembe véve meghatározhatjuk az egyes hullámcsomagok helyzetét és mozgását $t \rightarrow \pm\infty$ -nél. Ez az analízis világítja meg a (73) sajátfüggvény fizikai jelentését.

Amikor t nagy negatív szám ($t \rightarrow -\infty$), az A -koefficiens tartalmazó csomag középpontja nagy negatív x -nél van és az origó felé mozog. Hasonló helyzetű a D -t tartalmazó csomag is, de ez a tag *csak a pozitív x -tengelyen érvényes*, ahol egy olyan hullámcsomag, amelynek a maximuma nagy negatív x -nél van, már elhanyagolhatóan kicsi (nulla). A fennmaradó két tag maximuma nagy pozitív x -nél van, ezért közülük csak a B -t tartalmazó tag nem zérus és ugyancsak az origó felé mozgó csomagot ír le.

Ezért ha az első esetet akarjuk tárgyalni (amikor a bejövő részecske balról érkezik), a B -t nullának kell választani, amikor pedig a másodikat, akkor A az, ami nulla.

Tárgyaljuk először az első esetet ($B = 0$). Ekkor tehát nagy negatív t -nél nem látunk mást, mint egy balról bejövő csomagot, amely az A -val arányos. Az A alkalmas választásával elérhetjük, hogy 1-re legyen normálva. Amikor a csomag az origó közelébe ér, a hullámkép bonyolulttá válik, de $t \rightarrow \infty$ -nél újra kitisztul. Ekkor az A -val arányos csomag maximuma nagy pozitív x -nél volna, ahol már nem érvényes, ezért a negatív x -tengelyen elhanyagolható (nulla). Ugyancsak nagy pozitív x -nél van a D -vel arányos csomag maximuma is, ami viszont érvényes és pozitív irányban mozog: ez az *átengedett (transzmittált) hullám*. A C -vel arányos csomag maximuma $t \rightarrow \infty$ esetén nagy negatív x -nél található, ahol szintén érvényes és negatív irányú mozgást végez: ez a csomag a *visszavert (reflektált) hullám*. A tömegpont reflexiója tipikus kvantum-effektus, $E > U$ -nál klasszikusan a potenciállépcső minden részecskét átenged.

Legyen tehát (73)-ben $B = 0$ és vezessük be az r_b reflexiós és a t_b transzmissziós koefficiensst a

$$C = r_b \cdot A \quad D = t_b \cdot A$$

összefüggésekkel. A b index arra utal, hogy a részecske a potenciálba *befelé* mozog. Akkor

$$\psi(x) = A \cdot \begin{cases} e^{ikx} + r_b e^{-ikx} & (x < 0) \\ t_b e^{ik_1 x} & (x > 0). \end{cases} \quad (75)$$

Annak feltétele, hogy ez a megoldás és deriváltja $x = 0$ -ban folytonos legyen a következő:

$$\begin{aligned} 1 + r_b &= t_b \\ ik - ikr_b &= ik_1 t_b, \end{aligned}$$

ahonnan

$$\left. \begin{aligned} r_b &= \frac{k - k_1}{k + k_1} \\ t_b &= \frac{2k}{k + k_1} \end{aligned} \right\} \quad (76)$$

Az r_b és a t_b fizikai jelentésének a tisztázása érdekében térjünk vissza a hullámcsomagokhoz. Mint mondtuk, az A -t választhatjuk úgy, hogy a bejövő csomag legyen 1-re normált. Milyen W_r és W_t valószínűséggel találjuk $t \rightarrow \infty$ -nél a beeső részecskét a visszavert ill. az átengedett csomagban?

Ez a két valószínűség az $\int_{-\infty}^0 dx \cdot |\psi(x, t)|^2$ és az $\int_0^{\infty} dx \cdot |\psi(x, t)|^2$ integrálokkal lesz egyenlő, amikor $t \rightarrow +\infty$. A két integrál azonban kifejezhető a reflexiós és a transzmissziós koefficiensen keresztül a következő gondolatmenet alapján:

Az r_b és a t_b azt mutatja meg, hogyan aránylik a visszavert és az átengedett hullám *amplitúdója* a beeső hullám amplitúdójához, ezért W_r -nek $|r_b|^2$ -el, W_t -nek pedig $|t_b|^2$ -el kell arányosnak lennie. A reflektált csomagnál az arányosság egyenlőséggé válik, mert a reflektált csomag sebessége egyenlő a beesőével és ezért a két csomag hullámfüggvénye — az r_b faktortól eltekintve —, megegyezik egymással.

A transzmittált csomag csoportsebessége azonban k_1/k -szor akkora, mint a beesőé, ezért ennek a hullámnak a térbeli kiterjedése („hossza”) nem ugyanaz, mint a reflektálté és a beesőé. Valóban, legyen a beeső hullám x -irányú mérete L . Ekkor a hullám $T = L/v_g$ ideig fedi az origót. A reflektált és a transzmittált hullám ezalatt az idő alatt jön létre, ezért méretük $L_r = v_g T = L$ -el és $L_t = \frac{k_1}{k} v_g T = \frac{k_1}{k} L$ -el egyenlő. A valószínűségeket kifejező integrálok ezekkel a méretekkel is arányosak. Ennek alapján

$$W_r = |r_b|^2 \quad W_t = \frac{k_1}{k} |t_b|^2.$$

Ha valaki nem tartja elég meggyőzőnek a W_t -nek ezt a számítását, meghatározhatja a $W_r + W_t = 1$ egyenlőségből is, mint azt a következő feladat mutatja:

62.Feladat: Igazoljuk, hogy a két valószínűség összege 1.♣

63.Feladat: Tárgyaljuk le a második esetet, amikor a részecske jobbról érkezik p_1 impulzussal.

Megoldás: A (73)-ben ekkor $A = 0$ választandó, és $C = t_k \cdot B$, $D = r_k \cdot B$. A k index arra utal, hogy részecske a potenciálból *kifelé* mozog.

$$\psi(x) = B \cdot \begin{cases} t_k e^{-ikx} & (x < 0) \\ e^{-ik_1 x} + r_k e^{ik_1 x} & (x > 0). \end{cases}$$

$$\begin{aligned} 1 + r_k &= t_k \\ -ik_1 + ik_1 r_k &= -ikt_k, \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} r_k &= \frac{k_1 - k}{k + k_1} \\ t_k &= \frac{2k_1}{k + k_1}. \end{aligned} \right\} \quad (77)$$

A reflexió valószínűsége $|r_k|^2$, a transzmisszióé $\frac{k}{k_1} |t_k|^2$. Mint látjuk, ezek a képletek az előző eset képleteiből a $k \longleftrightarrow k_1$ cserével kaphatók. Vegyük észre, hogy rögzített E mellett W_r és W_t ugyanaz akár jobbról, akár balról jön a részecske.♣

3.35. A potenciállépcső ($0 < E < U$)

Az előző eset k_1 -e helyett most κ_1 -t vezetjük be a $\frac{2m(E-U)}{\hbar^2} = -\kappa_1^2$ relációval ($\kappa_1 > 0$). A Schrödinger-egyenlet a következő:

$$\begin{aligned}\psi'' + k^2\psi &= 0 & (x < 0) \\ \psi'' - \kappa_1^2\psi &= 0 & (x > 0).\end{aligned}$$

Az általános megoldás:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Ce^{-ikx} & (x < 0) \\ Be^{-\kappa_1 x} + De^{\kappa_1 x} & (x > 0), \end{cases}$$

A D -vel arányos tag $x \rightarrow \infty$ -nél végtelenhez tart, ezért ha $D \neq 0$, a $\psi(x)$ nem normálható. Ennek következtében feltétlenül $D = 0$ -t kell választanunk. Legyen továbbá $C = r \cdot A$, $B = b \cdot A$. Ekkor

$$\psi(x) = A \cdot \begin{cases} e^{ikx} + re^{-ikx} & (x < 0) \\ be^{-\kappa_1 x} & (x > 0), \end{cases}$$

ahonnan

$$\begin{aligned}1 + r &= b \\ ik - ikr &= -b\kappa_1.\end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned}r &= \frac{k - i\kappa_1}{k + i\kappa_1} \\ b &= \frac{2k}{k + i\kappa_1}.\end{aligned} \right\} \quad (78)$$

Vegyük észre, hogy a képleteink szoros kapcsolatban vannak az $E > U$ első esetével (amikor a részecske balról érkezik). Ha az ottani képletekben végrehajtjuk a $k_1 \rightarrow +i\kappa_1$ helyettesítést, a jelen fejezet képleteit kapjuk, speciálisan r_k -ből r -t. Ennek ellenére, r_k és r lényegesen különbözik egymástól: Az r_k negatív valós, míg r egységnyi abszolút értékű komplex szám (fázisfaktor).

A $\psi(x)$ -ből képezhető hullámcsomagok mozgása az $x < 0$ tartományban ugyanúgy analízálható, mint az előző fejezetben: $t \rightarrow -\infty$ -nél csak bejövő hullám van jelen (A amplitúdóval), $t \rightarrow \infty$ -nél pedig csak visszavert hullám (rA amplitúdóval). Mivel azonban $|r| = 1$, ezért $|rA| = |A|$, aminek következtében $W_r = 1$, és $W_t = 1 - W_r = 0$.

Ha A -t úgy választjuk, hogy a beeső csomag legyen 1-re normált, akkor a reflektált csomag is 1-re normált.

Az $x > 0$ tartomány klasszikusan tiltott. $t \rightarrow \pm\infty$ -nél a hullámfüggvény és a találati valószínűség itt zérus. A $\psi(x)$ b -vel arányos része azonban mutatja, hogy véges időknél ($t \approx 0$ -ban) a részecske bizonyos valószínűséggel behatol az $x > 0$ tartományba, de csak az $x = 0$ ponthoz közel található észrevehető valószínűséggel. Az $x \gg 1/\kappa_1$ tartományban ugyanis az $e^{-\kappa_1 x}$ függvény nagyon kicsi. A *behatolási mélységet* az $1/\kappa_1$ hosszdimenziójú mennyiség jellemzi. Hangsúlyozzuk, hogy a részecske csak rövid ideig tartózkodhat a klasszikusan tiltott tartományban, mivel $t \rightarrow \infty$ -nél megint $W_r = 1$ valószínűséggel lesz található a negatív x -tengely távoli tartományában.

Amikor $U \rightarrow \infty$ (*végtelen potenciálfal*), $\kappa_1 \rightarrow \infty$ és $x > 0$ -nál a hullámfüggvény nullához tart, a reflexiós koefficiens pedig $r = -1$: a reflexió „ellentett fázisban” következik be. A deriváltak nem kell folytonosnak lennie (ld. a 33.fejezet végét).

64.Feladat: Mutassuk meg, hogy potenciállépcsőnél $E < 0$ nincs a spektrumban.

Megoldás: Negatív E -nél k^2 helyett a $\frac{2mE}{\hbar^2} = -\kappa^2$ -t ($\kappa > 0$) vezetjük be. A Schrödinger egyenlet általános megoldása

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{-\kappa x} + Ce^{\kappa x} & (x < 0) \\ Be^{-\kappa_1 x} + De^{\kappa_1 x} & (x > 0). \end{cases}$$

Ahhoz, hogy $r \rightarrow \pm\infty$ -nél ψ ne növekedjen, B -t és C -t nullának kell választani. A ψ folytonossága $x = 0$ -ban $A = D$, a ψ' folytonossága pedig $-\kappa A = \kappa_1 D$ teljesülését követeli meg. Ez a két egyenlőség azonban csak $A = D = 0$ mellett teljesülhet, ami azt jelenti, hogy negatív E -hez nem tartozik normálható hullámfüggvény, negatív energiák nincsenek a spektrumban. Negatív energia a megfelelő klasszikus mozgásban sem lehetséges a 33.fejezetben mondottakkal összhangban.♣

Összefoglalva tehát megállapíthatjuk, hogy a (72) potenciális energiát tartalmazó Hamilton-operátor spektruma $U > 0$ -nál folytonos és a $0 \leq E < \infty$ félegyenest foglalja el.

3.36. Áthaladás potenciálgáton ($E > U$)

Potenciálgátnak az

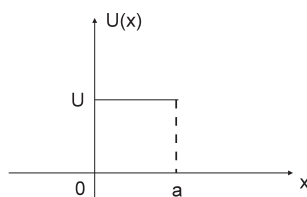
$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \text{ és } x > a \\ U = \textit{konstans} & 0 < x < a \end{cases} \quad (79)$$

erőfüggvényt nevezük.

Amikor $E > U$, a klasszikus mechanika szerint a gát minden ráeső részecskét átenged. A kvantumelméleti tárgyalás a potenciállépcsőhöz hasonló: a Schrödinger-egyenlet általános megoldása azonnal felírható az $x < 0$, $0 < x < a$, $x > a$ tartományokban és összesen hat konstansot tartalmaz:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Ce^{-ikx} & (x < 0) \\ Be^{ik_1x} + De^{-ik_1x} & (0 < x < a) \\ Ee^{ikx} + Fe^{-ikx} & (a < x) \end{cases}$$

Ezek közül az egyik nulla annak következtében, hogy a tömegpont határozottan az egyik oldalról érkezik (balról bejövő részecske esetében pl. $F = 0$ választandó), négyet a folytonossági feltételek rögzítenek az erőfüggvény szakadási pontjaiban, végül az utolsót a deltára történő normálási feltétel határozza meg. Ez az út járható és biztonságos, de hosszadalmas: sokkal szórakoztatóbb, ha a stacionér hullámterjedésről kialakított intuitív fizikai elképzelésünkre és az előző fejezetek egyszerű képleteire támaszkodunk.



11. ábra.

Ehhez a gondolatmenethez elegendő az $x < 0$ és az $x > a$ tartományban felírni a Schrödinger-egyenlet általános megoldását. Az erőfüggvény két oldala szimmetrikus, ezért az általánosság megszorítása nélkül feltehetjük, hogy a tömegpont balról érkezik. A bejövő hullám A amplitúdóját kiemeljük és ilymódon a (75)-el teljesen analóg szerkezetű hullámfüggvényre jutunk:

$$\psi(x) = A \cdot \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} & (x < 0) \\ Te^{ikx} & (x > a), \end{cases} \quad (80)$$

ahol természetesen $k = p/\hbar$, $p = \sqrt{2mE}$. Az R és a T a gát reflexiós és transzmissziós koeficiense. Ezeket kell kifejezni a gátat határoló két potenciállépcső reflexiós és transzmissziós koeficiensén keresztül.

Ez az energia-sajátfüggvény az $e^{-i\omega t}$ fázisfaktoron keresztül függ az időtől. Ezt a faktort a jobboldal minden tagjába be kell írni, aminek következtében a minden tag

monokromatikus síkhullámmá válik:

$$\psi(x, t) = A \cdot \begin{cases} e^{i(kx - \omega t)} + Re^{i(-kx - \omega t)} & (x < 0) \\ Te^{i(kx - \omega t)} & (x > a). \end{cases} \quad (81)$$

Fizikailag realizálható (normálható) állapotot — mint tudjuk, — p -szerinti szuperpozíció-képzéssel (integrálással) kapunk. A végtelen síkhullámokból hullámcsomagok jönnek létre, amelyek mozgását éppen úgy végigkövethetjük, mint a potenciállépcsőnél. Az eredmény is hasonló: reflektált hullám jön létre (amplitúdója $A \cdot R$), a transzmittált hullám amplitúdója pedig $A \cdot T$. A reflexió és a transzmisszió valószínűsége $|R|^2$ -el és $|T|^2$ -el egyenlő ($|R|^2 + |T|^2 = 1$).

Az R és a T kiszámítását a végtelen monokromatikus síkhullámokra alapozzuk, amelyek (81)-ben szerepelnek. Próbáljuk meg kiszámítani a hullámkép alapján $\psi(a, t)$ -t egy adott t pillanatban. A hullám nagysága az $x = a$ -ban (és a rögzített időpontban) végtelen sok „parciális hullám” összegéből (interferenciájából) áll elő:

$$\psi(a, t) = \psi_0(a, t) + \psi_1(a, t) + \psi_2(a, t) + \dots \quad (82)$$

Ebben a képletben az első tag

$$\psi_0(a, t) = t_b \cdot Ae^{-i\omega(t - \Delta t)} \cdot e^{i(k_1 a - \omega \Delta t)} = t_b \cdot Ae^{ik_1 a} \cdot e^{-i\omega t},$$

ahol $\Delta t = a/v_f$, a hullám áthaladási ideje a gáton, az $Ae^{-i\omega(t - \Delta t)}$ faktor a bejövő $Ae^{i(kx - \omega t)}$ síkhullám az $x = 0$ pontban a $t - \Delta t$ pillanatban, $k_1 = \frac{\sqrt{2m(E - U)}}{\hbar}$

pedig a részecske hullámvektora a potenciálgáton belül. Az $e^{i(k_1 a - \omega \Delta t)}$ faktor veszi figyelembe a hullám terjedését az $x = 0$ és az $x = a$ pont között²⁶. A képlet szerkezete mutatja, hogy ez a $\psi_0(a, t)$ az a járulék $\psi(a, t)$ -hez, amelyik közvetlenül a beeső hullámból származik.

A beeső hullám azonban végtelen kiterjedésű síkhullám és ezért az adott pillanatban lesz $\psi(a, t)$ -hez olyan $\psi_1(a, t)$ járulék is, amelyik a $t - 2\Delta t$ pillanatban érkezett be először az $x = a$ pontba, de onnan visszaverődött és az $x = 0$ -beli potenciállépcsőről szintén visszaverődve jutott újra az $x = a$ pontba. Ez a járulék a

$$\psi_0(a, t - 2\Delta t) \cdot r_k \cdot e^{i(k_1 a - \omega \Delta t)} \cdot r_k \cdot e^{i(k_1 a - \omega \Delta t)} = \psi_0(a, t) \cdot r_k \cdot e^{ik_1 a} \cdot r_k \cdot e^{ik_1 a}$$

²⁶Ennek a kifejezésnek az exponensében a síkhullám kezdeti és végponti fázisának különbsége szerepel:

$$[k_1(x + a) - \omega(t + \Delta t)] - [k_1 x - \omega t] = k_1 a - \omega \Delta t.$$

Mivel k_1 és a pozitív, ez a kifejezés balról jobbra terjedő hullámra vonatkozik. Alább fordított irányú terjedésről is szó lesz. Ekkor a képletben mind k_1 , mind a negatív, ezért a fáziskülönbség, amely csak a szorzatukat tartalmazza, változatlan marad.

-val egyenlő. Azért használjuk az r_k reflexiós koefficiienst, mert a reflexió mindkét esetben a potenciálból kifelé történő mozgásnál következik be. Megint felhasználhattuk, hogy a (82) tagjai az $e^{-i\omega t}$ fázisfaktoron keresztül függenek az időtől. Látjuk, hogy a Δt időkésséssel igazából nem kell törődnünk: ha a ψ_0 -ba $t-t$ írunk, ezzel automatikusan figyelembe vesszük a terjedési időt a gáton belüli reflexiónál.

Az elv most már világos: az egyes „parciális hullámok” abban különböznek egymástól, hogy hányszor szenvedtek reflexiót a gáton belül. Ezek a hullámok különböző időpontokban érkeznek be, de ez — mint láttuk —, nem bonyolítja el a tárgyalást.

Nyilván $\psi_{n+1}(a, t) = \psi_n(a, t) \cdot (r_k e^{ik_1 a})^2$, a „parciális hullámok” szerinti összeg tehát geometriai sor $(r_k e^{ik_1 a})^2$ koefficienssel. A geometriai sor összegképlete alapján

$$\psi(a, t) = \frac{\psi_0(a, t)}{1 - (r_k e^{ik_1 a})^2} = \frac{t_b e^{ik_1 a}}{1 - r_k^2 e^{2ik_1 a}} \cdot A e^{-i\omega t}.$$

Ez az a hullám, amelyik balról esik rá az $x = a$ -beli potenciállépcsőre. Az átengedett rész $t_k \psi(a, t)$ és ez azonos $A T e^{i(ka - \omega t)}$ -vel, ahonnan

$$T = e^{i(k_1 - k)a} \cdot \frac{t_b t_k}{1 - r_k^2 e^{2ik_1 a}}. \quad (83)$$

Célszerű ezt a képletet átalakítani:

$$t_b t_k = \frac{4kk_1}{(k + k_1)^2} = \frac{(k + k_1)^2 - (k - k_1)^2}{(k + k_1)^2} = 1 - r_k^2,$$

Ilymódon

$$T = e^{i(k_1 - k)a} \cdot \frac{1 - r_k^2}{1 - r_k^2 e^{2ik_1 a}}. \quad (84)$$

Az $x = a$ -ról visszavert hullám $r_k \psi(a, t)$. Ez, mire az $x = 0$ ponthoz érkezik, $r_k e^{ik_1 a} \psi(a, t)$ -vel egyenlő. Ha ezt a hullámot t_k -val megszorozzuk, megkapjuk a potenciálgátról visszavert hullámnak azt a részét, amely „megjárta” a gát belső tartományát²⁷. Ehhez természetesen még hozzá kell adnunk $A r_b e^{-i\omega t}$ -t, így kapjuk meg a gát által visszavert $R e^{-i\omega t}$ hullámot az origóban. Ennek a megfontolásnak az alapján

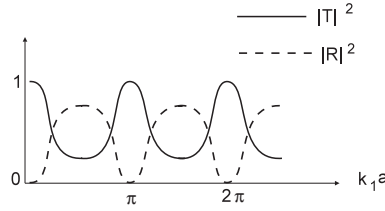
$$R = r_b + \frac{r_k t_k t_b e^{2ik_1 a}}{1 - r_k^2 e^{2ik_1 a}}.$$

²⁷Ha $\psi(a, t)$ -t a (82) összeg alakjában képzeljük el, a reflektált hullám is felbomlik olyan „parciális hullámok” összegére, amelyek meghatározott számú reflexiót szenvedtek a gáton belül.

A $t_k t_b$ -t újra átalakítjuk és felhasználjuk, hogy $r_k = -r_b$:

$$R = r_b \left[1 - \frac{(1 - r_b^2)e^{2ik_1a}}{1 - r_b^2 e^{2ik_1a}} \right] = r_b \frac{1 - e^{2ik_1a}}{1 - r_b^2 e^{2ik_1a}}. \quad (85)$$

Ezek a képletek pozitív és negatív U -nál egyaránt érvényesek.



12. ábra.

Annalizáljuk a transzmisszió valószínűségét:

$$|T|^2 = \frac{(1 - r_k^2)^2}{1 + r_k^4 - 2r_k^2 \cos 2k_1 a}.$$

A $\cos 2k_1 a = 1 - 2 \sin^2 k_1 a$ képlet alapján

$$|T|^2 = \frac{(1 - r_k^2)^2}{(1 - r_k^2)^2 + 4r_k^2 \sin^2 k_1 a} = \frac{1}{1 + \frac{4r_k^2 \sin^2 k_1 a}{(1 - r_k^2)^2}}.$$

Azoknál a speciális E_n energiáknál, amelyekhez $k_1 a = n\pi$ tartozik $\sin^2 k_1 a$ nullával egyenlő, a transzmisszió valószínűsége tehát 1, a reflexió valószínűsége pedig 0. Ha E -t rögzítjük és a transzmisszió valószínűségét a potenciálgát szélességének a függvényében vizsgáljuk, akkor ez az „anomális reflexióhiány” azoknál az a_n gátméreteknél következik be, amelyek $n\frac{\pi}{k_1}$ -el egyenlők (ld. a 12.ábrát).

A reális kísérletekben az „anomális reflexióhiány” abban jelentkezik, hogy bizonyos speciális energiáknál az elektronok szóródása a nemes gázok atomjain jelentősen lecsökken (Ramsauer-effektus). Megjegyezzük, hogy ebben a lényegesen három dimenziós esetben az effektus csak vonzó potenciálnál ($U < 0$) lép fel.

3.37. Áthaladás potenciálgáton ($0 < E < U$)

Ebben az esetben $\frac{2m(E - U)}{\hbar^2} < 0$ és ezért $-\kappa_1^2$ -el kell egyenlíteni. Világos, hogy $k_1 = \pm i\kappa_1$. A 35.fejezetben láttuk, hogy a felső előjel választása a helyes: $k_1 = i\kappa_1$.

Ha ezt a helyettesítést elvégezzük az előző fejezet megfelelő képleteiben²⁸, megkapjuk a potenciálgát reflexiójának és transzmissziójának a valószínűségét abban az esetben, amikor a potenciális energia nagyobb a bejövő részecske kinetikus energiájánál. Klasszikusan ekkor minden részecske visszaverődik, a kvantumelmélet szerint azonban transzmissziót is kapunk (*alagút-effektus*), ami azzal függ össze, hogy a kvantummechanika megengedi a tömegpont behatolását a klasszikusan tiltott tartományba:

$$T = e^{-\kappa_1 a} \cdot e^{-ika} \cdot \frac{1 - r^2}{1 - r^2 e^{-2\kappa_1 a}},$$

$$R = r \cdot \frac{1 - e^{-2\kappa_1 a}}{1 - r^2 e^{-2\kappa_1 a}}.$$

A $|T|^2$ most nem periódikus, hanem az a növekedésével monoton csökken. Széles potenciálgátnál ($\kappa_1 a \gg 1$) az alagúteffektus (a transzmisszió) valószínűsége *a gát szélességével exponenciálisan csökken*:

$$|T|^2 \approx |1 - r^2|^2 e^{-2\kappa_1 a}, \quad (86)$$

amelyben

$$r^2 = \left(\frac{k - i\kappa_1}{k + i\kappa_1} \right)^2,$$

$$|1 - r^2|^2 = \left(\frac{4k\kappa_1}{k^2 + \kappa_1^2} \right)^2 = \frac{16E(U - E)}{U^2}.$$

Mivel $\kappa_1 \sim \sqrt{m}$, az alagúteffektus valószínűsége a tömeg növekedésével is rohamosan csökken. A makroszkópikus fizikában tehát — a mindennapos tapasztalattal összhangban, — az alagúteffektus valószínűsége elképzelhetetlenül kicsi.

A potenciálgát mutatja talán a legvilágosabban a különbséget a klasszikus fizika hullámainak és a kvantumelmélet hullámfüggvényének a fizikai jelentése között. Az elektromágneses hullámoknál pl. a potenciálgátnak dielektrikum-réteg (üveglap) felel meg. A klasszikus fényhullám részben áthalad ezen a rétegen, részben visszaverődik róla, és a kettévált hullámcsomag mindkét része hat az útjába eső töltésekre. Mint láttuk, minden egyes tömegpont hullámfüggvénye is hasonló módon kettévál, de fizikai hatást csak az egyik rész vált ki: vagy az átengedett, vagy a reflektált részecskeként útjában elhelyezett detektor szólal meg. Hogy melyik, azt a véletlen dönti el: a bejövő részecskék mind tökéletesen egyformák, semmi jel sem utal rajtuk arra, hogy áthaladnak-e majd a potenciállépcsőn vagy visszaverődnek róla.

²⁸Amikor $k_1 \rightarrow i\kappa_1$, akkor $r_b \rightarrow r$ és $r_k \rightarrow -r$.

A potenciálgáton történő áthaladásnak ez a kvantummechanikai sajátossága megengedné, hogy úgy képzeljük, a gát elérése után de még az esetleges megfigyelés előtt eldőlt, melyik részecske haladt át a gáton és melyik verődött vissza róla. Később, az interferencia tárgyalásánál megmutatjuk, hogy ez az elképzelés nem tartható: a W_r és a W_t kizárólag az *észlelési* valószínűséget adja meg, nem értelmezhető úgy, hogy a (még) nem észlelt részecske milyen valószínűséggel található a gáttól jobbra vagy balra.

3.38. A derékszögű potenciálvölgy

Potenciálvölgy úgy alakul ki, hogy a $-\frac{a}{2} < x < +\frac{a}{2}$ tartományt az $x = \pm\frac{a}{2}$ pontokban egy-egy U magasságú potenciállépcső határolja:

$$U(x) = \begin{cases} U = \textit{konstans} > 0 & \text{ha } |x| > \frac{a}{2} \\ 0 & \text{ha } |x| < \frac{a}{2}. \end{cases}$$

Az $E > U$ eset a fizikai jelenségek szempontjából ugyanaz, mint a potenciálgát $U < 0$ -nál (36.fejezet).

Most is belátható, hogy negatív energiák nincsenek a spektrumban.

Az új a $0 < E < U$ tartomány, ahol a klasszikus mozgás korlátos (a tömegpont a két potenciálfal között pattog), ezért a kvantumelméletben diszkrét spektrum várható. Ezen a példán az is jól látható, hogy miért.

Az ok az, hogy a Schrödinger-egyenlet

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (-a/2 < x < a/2) \\ Ce^{-\kappa_1 x} + De^{\kappa_1 x} & (x < -a/2) \\ Ge^{\kappa_1 x} + Fe^{-\kappa_1 x} & (a/2 < x) \end{cases}$$

általános megoldásában szereplő hat konstans közül most először kell *kettőt* nullának választani mindjárt a tárgyalás kezdetén ($C = G = 0$). Az $x > a/2$ és az $x < -a/2$ tartományokban ugyanis az általános megoldás nem periódikus, hanem egy növekvő és egy csökkenő exponenciális függvény lineárkombinációja. Mivel a megoldás $x \rightarrow \pm\infty$ -nél nem növekedhet, ezért a két növekvő megoldás koefficiensét nullának kell választani. A fennmaradó négy konstanssal általában nem lehet kielégíteni a négy folytonossági feltételt. Ezek a feltételek ugyan négy lineáris egyenletet jelentenek a négy konstansra nézve, de mivel *homogének*, csak akkor van zérustól különböző megoldásuk, ha az egyenlet determinánsa zérus. A determináns azonban a k -n és a κ_1 -n keresztül tartalmazza E -t és csak azok a diszkrét energiák lesznek sajátértékek, amelyek a determinánst nullává teszik.

A korábbi feladatokban a folytonosságot kifejező egyenletekben — amelyek szintén homogén lineáris egyenletek voltak, — mindig *eggyel több ismeretlen koefficiens* szerepelt, mint amennyi egyenlet volt. Ezért az egyenleteket akadály nélkül ki lehetett elégíteni és még maradt is egy szabad konstans, amit normálásra lehetett felhasználni. De ez csak végtelen mozgásnál van így, korlátos mozgásnál — mint most látjuk, — a megoldásra kirótt feltételek E lehetséges értékeit is korlátozzák.

A potenciállépcső r reflexiós koefficiensének az ismerete $E < U$ -nál ((78) képlet) lehetővé teszi, hogy a megoldás menetét egyszerűsítsük. Elegendő lesz a $-a/2 < x < a/2$ *belső tartományra* korlátozódni, ahol az általános megoldás

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx},$$

amelyben $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. A két külső tartomány hatását a falak reflexiós koefficienseivel vehetjük figyelembe, mivel mindkét falnál a visszavert hullám a falra ráeső hullám r -szerese. Ha hullámcsomagot képeznénk (amire nincs igazán szükség), a $\psi(x)$ A -val arányos tagja jobbra, B -vel arányos tagja pedig balra haladó csomagot írna le. Ha a baloldali falat tekintjük ($x = -a/2$ -nél), akkor a B -vel arányos hullám a beeső, az A -val arányos hullám pedig a visszavert hullám. A jobboldali falnál a helyzet fordított. Fenn kell tehát állnia a következő két összefüggésnek:

$$A \cdot e^{-ik\frac{a}{2}} = r \cdot B \cdot e^{ik\frac{a}{2}} \quad \text{a reflexió feltétele az } x = -a/2 \text{ falnál}$$

$$B \cdot e^{-ik\frac{a}{2}} = r \cdot A \cdot e^{ik\frac{a}{2}} \quad \text{a reflexió feltétele az } x = a/2 \text{ falnál.}$$

Ez két homogén lineáris egyenlet az A , B ismeretlenekre, amelyek általában el-
lentmondanak egymásnak, ezért $A = B = 0$ a megoldásuk. Kivételt csak azok az esetek képeznek, amikor az egyenletek nem függetlenek (az egyenletrendszer determinánsa zérus), vagyis az A -t szorzó koefficiensek aránya megegyezik a B -t szorzó koefficiensek arányával:

$$e^{-ika/2} : re^{ika/2} = re^{ika/2} : e^{-ika/2},$$

ahonnan

$$r^2 e^{i \cdot 2ka} = 0,$$

azaz

$$re^{ika} = \pm 1. \tag{87}$$

Ha ezt visszahelyettesítjük az A , B -re vonatkozó egyenletrendszerbe, azt találjuk, hogy a felső előjelnél $A = B \equiv N/2$, és a sajátfüggvény

$$\psi(x) = N \cdot \cos kx \quad \text{felső előjelnél,}$$

az alsónál $A = -B \equiv N/2i$, a sajátfüggvény pedig

$$\psi(x) = N \cdot \sin kx \quad \text{alsó előjelnél.}$$

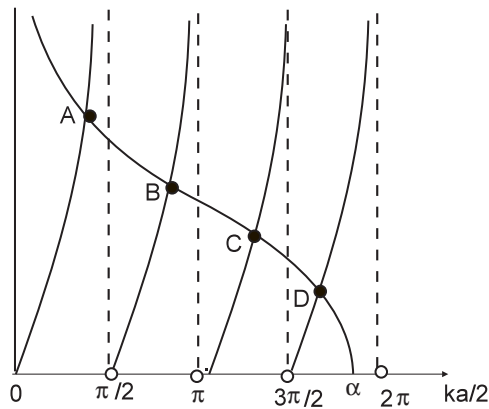
A (87) egyenlet csak numerikusan oldható meg E -re. Ennek érdekében írjuk fel a $k + i\kappa_1$ komplex számot a $\sqrt{k^2 + \kappa_1^2} \cdot e^{i\varphi}$ alakban, ahol $\varphi = \operatorname{arctg} \frac{\kappa_1}{k}$. Akkor

$$r = \frac{k - i\kappa_1}{k + i\kappa_1} = e^{-i \cdot 2\varphi},$$

és (87) az

$$e^{i(ka - 2\varphi)} = \pm 1$$

alakot ölti, ahonnan



A,C: gyökhelyek felső előjelnél

B,D: gyökhelyek alsó előjelnél

13. ábra.

$$ka - 2\varphi = \begin{cases} 0 + 2\pi \cdot n & \text{felső előjelnél} \\ \pi + 2\pi \cdot n & \text{alsó előjelnél} \end{cases}$$

(n tetszőleges egész). Ezt φ -re megoldva és figyelembe véve, hogy a tangens függvény periódusa π , azt találjuk, hogy

$$\operatorname{tg} \varphi = \begin{cases} \operatorname{tg} \frac{1}{2}ka & \text{felső előjelnél} \\ \operatorname{tg} \frac{1}{2}(ka + \pi) & \text{alsó előjelnél.} \end{cases}$$

A φ definíciója alapján azonban

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{\kappa_1}{k} = \frac{\frac{\kappa_1 a}{2}}{\frac{ka}{2}}.$$

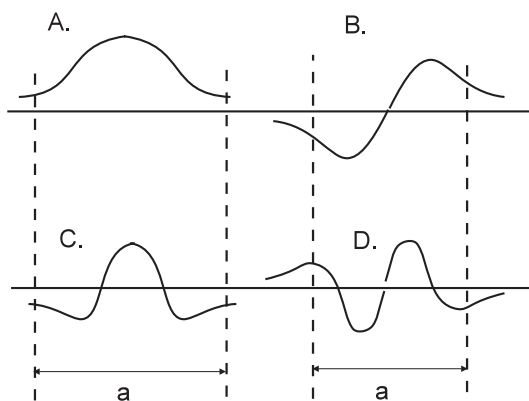
A számlálót is célszerű kifejezni a $\frac{ka}{2}$ törtön keresztül:

$$\frac{\kappa_1 a}{2} = \frac{a}{2} \cdot \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar} = \sqrt{\alpha^2 - \left(\frac{ka}{2}\right)^2} \quad \left(\alpha^2 = \frac{mUa^2}{2\hbar^2}\right).$$

Ezt felhasználva látjuk, hogy

$$\frac{\sqrt{\alpha^2 - \left(\frac{ka}{2}\right)^2}}{\frac{ka}{2}} = \begin{cases} \operatorname{tg} \frac{1}{2} ka & \text{felső előjelnél} \\ \operatorname{tg} \frac{1}{2} (ka + \pi) & \text{alsó előjelnél.} \end{cases} \quad (88)$$

A (88) egyenletek ismeretlene a $ka/2$ mennyiség, ez tartalmazza a keresett E energiát. A gyököket csak grafikus úton lehet megtalálni, mint a baloldalt ábrázoló és a jobboldalt ábrázoló függvény metszéspontjainak az abszcisszáit (13. ábra).



14. ábra.

A metszéspont abszcisszája — mint mondtuk, — a $ka/2$ értékét adja meg, amelyből az energia az $E = \frac{\sqrt{\hbar k}}{2m}$ képlet alapján számítható ki. A baloldali görbe α -ban metszi az abszcisszát, ahonnan következik, hogy az energiasajátértékek nem lehetnek

nagyobbak U -nál. Az $E < U$ tartományban annál több kötött állapotot kapunk, minél nagyobb az α , azaz minél nagyobbak az mUa^2 szorzat tényezői.

65.Feladat: Vázoljuk fel a két legalacsonyabb energiájú szinuszos és koszinuszos sajátfüggvényt.

Megoldás: Vegyük észre, hogy növekvő energiával a hullámfüggvény nullhelyeinek (*csomópont*) a száma is növekszik.♣

3.39. A végtelen potenciálgödör

Ha megelégszünk azoknak a kötött állapotoknak a vizsgálatával, amelyeknek az energiája sokkal kisebb, mint a potenciálfalak magassága ($E \ll U$), akkor célszerű az $U \rightarrow \infty$ határesetet tekinteni (*végtelen potenciálgödör*).

Ebben a határesetben $\kappa_1 \rightarrow \infty$, aminek két következménye van. Egyrészt a hullámfüggvény a gödrön kívül eltűnik, másrészt az r reflexiókoefficiens a -1 értéket veszi fel (a reflexió ellentétes fázisban történik). A végtelen falra ráeső és a róla visszaverődő hullám ennek következtében a falnál pontosan kioltja egymást, ezért a hullámfüggvény a fal helyén is zérus. Ezt követeli egyébként a sajátfüggvény folytonossága is. A gödör szélein azonban a derivált nem folytonos, a hullámfüggvénynek itt törése van ($U = \infty$ -nél ez megengedett, ld. a 33.fejezetet). A (87) egyenlet ekkor

$$e^{ika} = \mp 1, \quad (89)$$

amely azoknál a $k = k_n$ értékeknél teljesül, amelyekre $k_n = \frac{n \cdot \pi}{a}$ (n egész). A hullámhosszra nézve ez a feltétel $\lambda_n = \frac{2\pi}{k_n} = \frac{2a}{n}$ alakú, ami azt fejezi ki, hogy a félhullámhossznak maradék nélkül kell elférnie a gödörben. A sajátenergiák a következők:

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots),$$

a sajátfüggvények pedig

$$e_n(x) = \begin{cases} N_n \cdot \cos\left(n\pi \frac{x}{a}\right) & n = 1, 3, 5, 7, \dots \quad \text{felső előjelnél} \\ N_n \cdot \sin\left(n\pi \frac{x}{a}\right) & n = 2, 4, 6, 8, \dots \quad \text{alsó előjelnél} \end{cases} \quad (90)$$

Az $n = 0$ -t azért kellett kizárni, mert nem tartozik hozzá sajátfüggvény, a negatív n -khez pedig nem tartozik új sajátfüggvény²⁹.

Ezt a feladatot a Bohr-Sommerfeld modellben is tárgyaltuk (9.fejezet). Ugyanazt az energiaspektrumot kaptuk, mint most (ld. (7)-t), azzal a különbséggel, hogy az

²⁹Az energiasajátfüggvényeket a lineáris harmonikus oszcillátor sajátfüggvényeihez hasonlóan most is $e_n(x)$ -el jelöltük, mert ez a jelölés kifejezi, hogy diszkrét bázis elemeiről van szó, és nem fenyeget a veszély, hogy a két különböző függvényrendszert összekeverjük egymással.

$n = 0$ is lehetséges volt és nulla energia tartozott hozzá. A bizonytalansági reláció azonban ezt nem engedi meg, hiszen ha a tömegpont koordinátáját $\Delta\hat{x} \approx a$ pontossággal adott, akkor az impulzusa — és vele együtt az energiája — nem lehet határozott (nulla): $\Delta\hat{p}$ értéke ugyanis \hbar/a körüli vagy nagyobb. A kvantummechanika szerint a legalacsonyabb energia $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$, ez a dobozba zárt tömegpont zéruspont energiája.

66.Feladat: Határozzuk meg az

$$U(x) = \begin{cases} +\infty & x < 0 \\ \frac{D}{2}x^2 & x > 0 \end{cases}$$

erőfüggvény terében mozgó tömegpont sajátenergiáit és sajátfüggvényeit.

Megoldás: Klasszikusan a mozgás korlátos ezért a spektrum diszkrét. A sajátfüggvények a negatív x -tengelyen és az origóban zérussal egyenlők, a pozitív x -tengelyen pedig arányosnak kell lenniük a harmónikus oszcillátor valamelyik $e_n(x)$ sajátfüggvényével. Ezeket a 26.fejezetben diszkutáltuk. Az ott megtalált sajátfüggvények közül a folytonossági követelmény miatt csak azokat tarthatjuk meg, amelyek az origóban eltűnnek, vagyis amelyekben $H_n(0) = 0$. Könnyen beláthatjuk, hogy a páratlan indexű Hermite-polinomok rendelkeznek ezzel a tulajdonsággal. Ezért az energiasajátértékek a következők:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

A hozzájuk tartozó sajátfüggvények $x > 0$ -nál $\sqrt{2} \cdot e_n(x)$ -el, $x < 0$ -nál pedig zérussal egyenlők.♣

Ez az a pont, ahol talán megvilágíthatjuk de Broglie gondolatmenetét. De Broglie a diszkrét spektrum mibenlétét szerette volna megérteni a Bohr-Sommerfeld modellnél hagyományosabb alapon. Abból indult ki, hogy ha egyszer az atom által kibocsátott fény spektruma csak bizonyos frekvenciákat tartalmaz, akkor az atom — akármilyen legyen is a konkrét szerkezete, — csak *diszkrét frekvenciájú rezgésekre* képes. Márpedig olyan rendszereket, amelyek csak meghatározott *sajátfrekvenciákon* képesek szabadon rezegni, a klasszikus fizika is ismer: gondoljunk például a gitár húrjára, amely — ha megpendítjük, — meghatározott hangot ad ki, mert csak egy meghatározott alapprofrekvencián és felharmónikusain képes rezegni³⁰.

³⁰Az esetleges félreértések elkerülése érdekében megjegyezzük, hogy a kvantumelmélet csak részben igazolta de Broglie várákozását, amely a kisugárzott fény frekvenciáját tekintve a spektrális hasonlóság elvén alapult. A kisugárzott fény frekvenciája ugyanis nem az E_n/\hbar sajátfrekvenciákkal, hanem a sajátfrekvenciák az $(E_n - E_{n'})/\hbar$ különbségével egyenlő.

A húrnál a rezgő (hullámozó) mennyiség a keresztirányú kitérés, amelyet u -val fogunk jelölni. A nyugvó húr helyzete lesz az x -tengely, a kitérésről feltesszük, hogy kicsi és — mondjuk — z -irányú. Feltesszük továbbá, hogy a húrban a feszültség egy állandó f érték, és mindenütt párhuzamos a húr irányával.

A kitérés az x -koordináta és a t idő függvénye: $u = u(x, t)$. Számítsuk ki a húr $(x - \Delta x/2, x + \Delta x/2)$ szakaszára ható erőnek a kitéréssel párhuzamos (azaz z) komponensét!

Legyen α_- és α_+ a húr érintőjének irányszöge a kijelölt szakasz kezdő- és végpontjában. A húrnak az a része, amely a kiszemelt szakasztól jobbra esik, $f \cdot \sin \alpha_+$ erővel, a balra eső szakasz pedig $-f \cdot \sin \alpha_-$ erővel igyekszik elmozdítani a szakaszt z irányba. A szögek azonban kicsik, ezért a szinusz helyettesíthető tangenssel. Így

$$F(x, t) = f \cdot (\operatorname{tg} \alpha_+ - \operatorname{tg} \alpha_-) = \\ = f \left[\left(\frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right)_{x+\Delta x/2} - \left(\frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right)_{x-\Delta x/2} \right] = f \cdot \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \cdot \Delta x.$$

Az adott szakasz z -irányú gyorsulása $\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2}$ -el egyenlő, ezért a mozgását a

$$\rho \cdot \Delta x \cdot \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = f \cdot \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \cdot \Delta x$$

Newton-egyenlet határozza meg, amelyben ρ kg/m a húr sűrűsége, $\rho \Delta x$ pedig a kiszemelt szakasz tömege.

A Δx -el történő egyszerűsítés és az $\frac{1}{v_f^2} = \frac{\rho}{f}$ jelölés bevezetése után ez az egyenlet a

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{v_f^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0$$

hullámegyenletté változik, amelyet jól ismerünk. Általános *monokromatikus* megoldása a következő:

$$u(x, t) = A \cdot e^{i(kx - \omega t)} + B \cdot e^{i(-kx - \omega t)}.$$

A k és az ω nem független egymástól: a hullámegyenletbe történő visszahelyettesítés a

$$k = \frac{\omega}{v_f}$$

kapcsolatot állapítja meg közöttük.

Ebben a stádiumban még minden ω érték megengedett. Diszkrét sajátfrekvenciákhoz akkor jutunk, ha megköveteljük, hogy a végpontokban a húr legyen rögzített. Ha a húr az x -tengely $(-a/2, a/2)$ szakaszát foglalja el, akkor ezt a követelményt az

$$u(-a/2, t) = u(a/2, t) = 0$$

határfeltételek fejezik ki.

Helyettesítsük az általános megoldást a határfeltételekbe. Az $e^{-i\omega t}$ -vel törté-
nő egyszerűsítés után pontosan ugyanazt a lineáris egyenletrendszer kapjuk A -ra és
 B -re, mint a végtelen potenciálgödörben mozgó tömegpontnál, amelynek a megold-
hatósági feltétele a (89) egyenlet. Ez nem csoda, hiszen a megoldás mindkét esetben
síkhullámokból áll és a határfeltételek is azonosak (az egyenletek maguk azonban kü-
lönböznek). A (89) azt fejezi ki, hogy csak olyan hullámok léteznek, amelyeknek a fél-
hullámhossza egész-számú helyezhető el a húron:

$$\frac{1}{2}\lambda_n = \frac{\pi}{k_n} = \frac{a\pi}{n\pi} = \frac{a}{n},$$

a sajátfrekvenciák pedig az $\omega_1 = \frac{v_f\pi}{a}$ alapfrekvencia egész számú többszörösei:

$$\omega_n = v_f \cdot k_n = \frac{v_f\pi}{a} \cdot n.$$

Az eddigiekben azt illusztráltuk, hogyan jön létre a klasszikus fizikában diszkrét
frekvenciaspektrum. Ahhoz, hogy ezt a gondolatmenetet az atomszerkezetnél is kama-
toztathassa, az atomi elektronokat de Brogliennek valamilyen módon hullámmá kellett
változtatnia. Minden akkor ismert kísérlet azonban egybehangzóan azt tanúsította,
hogy az elektron — az elektromosság „atomja” — negatívan töltött *részecske*.

Bátyjával, Maurice-szal együtt — aki jónevű kísérleti fizikus volt, — Louis de
Broglie éveken keresztül töprengett Einstein fénykvantum-hipotézisének és a fény rej-
télyes kettős (korpuszkuláris és hullám) természetén. Fokozatosan az az elképzelés
alakult ki bennük, hogy ennek a kettősségnek univerzálisnak kell lennie, vonatkoznia
kell minden elemi objektumra: fénykvantumra, elektronra egyaránt. De arról, hogy
milyen természetű lehet a kapcsolat a részecskeszerű és a hullámszerű aspektusok
között, sokáig fogalmuk sem volt.

Pedig visszatekintve a dolog egyszerűnek látszik. Mint tudjuk, a relativitáselmélet
megengedi, hogy egy W energiájú, \vec{p} impulzusú részecskének $\omega = \frac{W}{\hbar}$ körfrekvenci-
ájú, $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ hullámvektorú síkhullámot feleltessünk meg (Elektrodinamika jegyzet
54§). A „megengedi” kifejezés azt jelenti, hogy ha ezt a megfeleltetést valamilyen
 \mathcal{K} inerciarendszerben végezzük el, akkor *minden* inerciarendszerben teljesül, noha az
 E , \vec{p} , ω , \vec{k} mennyiségek külön-külön megváltoznak, amikor az egyik inerciarendszer-
ről egy másikra térünk át. A Lorentz-transzformációnak ez a következménye azonban
a kvantumelmélet kialakulásának az idején még nem volt közismert³¹. De Broglie

³¹1905-ben, a fotoeffektusra adott magyarázatában Einstein csak a fénykvantumok energiájáról
beszélt, az impulzusukról nem. Csak 1917-ben jutott arra a gondolatra, hogy a fénykvantumoknak
impulzusa is van, de ezt nem a transzformációs törvényből kiindulva következtette ki.

egészen sajátos kerülőúton jutott el ezekhez a képletekhez, amelyet nincs módunkban ismertetni. A másodikat $\lambda = \frac{h}{mv}$ alakban fogalmazta meg és egy interferencia-kísérletet is javasolt az ellenőrzésére, amit sikerrel el is végeztek (a kísérlet modern változatát nemsokára diszkutálni fogjuk).

Ennek a megféleltetésnek az alapján de Broglie fel tudta írni a szabad részecskéhez rendelt síkhullám matematikai képletét anélkül, hogy ismerte volna a kvantummechanikában érvényes hullámegyenletet. Magának az egyenletnek a felfedezése Schrödingerre várt. De Broglie azonban a Schrödinger egyenlet ismerete nélkül is képes volt megmutatni, hogy a Bohr-Sommerfeld kvantumfeltételek hullámmechanikai nézőpontból is interpretálhatók: a bennük szereplő egész szám azzal függ össze, hogy a hullámhossznak egész számszor kell elférnie a részecske — önmagába záródó — pályája mentén. A tétel igazolására egy már száz éve létező, de alig ismert matematikai elméletet használt fel, a Hamilton által kidolgozott u.n. *optikai-mechanikai parallelizmust*, amely a geometriai optika és a mechanika mély szerkezeti hasonlóságára mutat rá. Az elméletben a részecskék pályájának a fénysugarak felelnek meg, amelyeket a lencsék és tükrök számításánál szoktunk felrajzolni. A tételt jól illusztrálja a dobozba zárt tömegpont, amelyet a Bohr-Sommerfeld modellben is, a Schrödinger-egyenlet segítségével is tárgyaltunk. Ez utóbbi tárgyalás — mint láttuk —, ugyanolyan állóhullámokra vezetett, mint amilyenek két, egymástól a távolságban elhelyezett párhuzamos tükör között alakulnak ki.

De Broglie munkássága jelentette az áttörést a kvantummechanika felé azon az úton, amely két évvel később Schrödinger munkáiban teljesedett ki. Schrödinger mutatta meg azt is, hogy Heisenberg elmélete, az u.n. mátrixmechanika, ami időközben született meg, a de Broglie - Schrödinger féle hullámmechanika egy másik, matematikailag ekvivalens formája.

Mindezideig nem érintettük azt a kérdést, hogy hogyan képzelte el de Broglie a részecskék és a részecskékhez rendelt hullámok kapcsolatát. Ma már aligha kételkedhetünk benne, hogy a de Broglie hullám (a hullámfüggvény) absz. négyzete annak a valószínűségi sűrűsége, hogy a részecskét, amelyet mindig egészben, pontszerű korpuszukulaként észlelünk, a tér mely pontjának a környezetében találjuk meg. De Broglie ezt másképp gondolta. Az volt az elképzelése, hogy a hullám is, a részecske is önálló létezéssel bíró objektum, és a kapcsolatuk abban áll, hogy a hullámter mintegy „vezeti” a részecskét a mozgásában (*hullámlovas elmélet*). Ennek a felfogásnak a szellemében a hullámter minden pontján egy-egy trajektória halad át, amelyeken a részecskék mozognak. A trajektóriákat a hullám alakjának kell meghatározni, de a trajektóriák kiszámítására sem ő, sem más nem dolgozott ki meghatározott eljárást. A valószínűségi értelmezés sikeressége alapján a várakozás az volt, hogy átlagban a részecskéket akkor is a Born-hipotézisnek megfelelő valószínűségekkel észlelnénk a tér különböző pontjaiban, ha egyébként a „hullámlovas elmélet” szerint mozognának.

De Broglie elképzelésének mindig voltak (és ma is vannak) hívei, de a fizikusok túlnyomó többsége a Born-hipotézisen alapuló valószínűségi értelmezést fogadja el. Minden jel szerint ez a legegyszerűbb olyan felfogása a kvantummechanikának, amelyik

az összes eddigi tapasztalattal összefér. Ez az értelmezés *lényegileg indeterminista*: nem azért nem tudjuk pontosan megjósolni az elektron mozgását, mert nem ismerjük elég pontosan a kezdeti feltételeket, hanem azért, mert a mikrofizikában nem érvényes a mozgás klasszikus felfogása. Mint láttuk, Heisenberg éppen ebből a felismerésből kiindulva jutott el a kvantummechanikához. A „hullámlovas elképzelés” ezzel szemben determinisztikus, ezért főleg olyanok részesítik előnyben, akik a determinisztikus fizikai világot tartják egyedül elfogadhatónak.

Áttérünk a háromdimenziós térben történő ($f = 3$ szabadsági fokú) mozgás kvantummechanikai tárgyalására.

3.40. Általánosítás háromdimenziós mozgásra

A 22. és a 23. fejezet tartalma természetesen módon általánosítható a háromdimenziós mozgás esetére.

Fizikai mennyiségen az x, y, z koordináták és a p_x, p_y, p_z impulzusok függvényeit értjük. Egy fizikai mennyiség operátorát úgy kapjuk meg, hogy a mennyiség klasszikus mechanikai képletében a koordinátákat és az impulzusokat az operátorokkal helyettesítjük.

A három koordináta- és a három impulzusoperátorból összesen 15 nemtriviális³² kommutátor képezhető, amelyek három kivételével mind nullák. Három dimenzióban ezeket a kommutátorokat nevezzük kanonikus felcserélési relációknak. A nemnulla kommutátorok a következők:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \quad [\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar \quad [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar.$$

A 23. fejezet gondolatmenetét külön-külön alkalmazva a három koordináta-impulzus párra könnyen meggyőződhetünk róla, hogy a $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ választható az x -el, y -al, z -vel való szorzás operátorának, a $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ pedig a megfelelő változó szerinti parciális deriválás \hbar/i -szeresének.

Az $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ koordinátaoperátorok kommutálnak egymás között, ezért van közös sajátvektorrendszerük, amelynek az elemeit \vec{e}_{xyz} -vel jelöljük:

$$\hat{x}\vec{e}_{xyz} = x\vec{e}_{xyz} \quad \hat{y}\vec{e}_{xyz} = y\vec{e}_{xyz} \quad \hat{z}\vec{e}_{xyz} = z\vec{e}_{xyz}.$$

A 23. fejezetben láttuk, hogy \hat{x} spektruma folytonos a $(-\infty, \infty)$ intervallumban. Az \hat{y} és a \hat{z} spektruma ugyanilyen tulajdonságú, vagyis x, y, z egymástól függetlenül bármilyen valós értéket fölvehet.

Az egydimenziós esethez képest azonban lényeges különbség, hogy mindhárom koordináta operátor mindegyik sajátértéke ∞^2 -szer elfajult. Az \hat{x} operátornak pl.

³²Minden operátor önmagával vett kommutátora triviálisan zérus.

mindegyik \vec{e}_{xyz} az $x = a$ -hoz tartozó sajátvektora. Az y -t is és a z -t is a -tól és egymástól függetlenül adhatjuk meg, ezért — képletesen szólva — az $x = a$ sajátértékű sajátvektorok száma annyi, ahány pont van a síkon.

Az \vec{e}_{xyz} -k folytonos, delta-függvényre normált bázist feszítenek ki a Hilbert-térben, amelyet most \mathcal{H}_{xyz} -vel jelölünk:

$$(\vec{e}_{xyz}, \vec{e}_{x'y'z'}) = \delta(x - x') \cdot \delta(y - y') \cdot \delta(z - z') \quad (-\infty < x, x', y, y', z, z' < \infty).$$

A három impulzusoperátor is kommutál egymással, ezért a koordinátaoperátorokhoz hasonló tulajdonságokkal rendelkeznek. Közös sajátvektoraikat $\vec{e}_{p_x p_y p_z}$ -vel jelöljük.

A továbbiakban kizárólag koordináta reprezentációban fogunk dolgozni. A \mathcal{H}_{xyz} minden vektorát kifejezhetjük az \vec{e}_{xyz} bázis szerint:

$$\vec{\psi} = \int d\Omega \cdot \psi(x, y, z) \vec{e}_{xyz},$$

ahol $d\Omega = dx \cdot dy \cdot dz$ a térfogatelem. A $\psi(x, y, z)$ háromváltozós függvény a $\vec{\psi}$ hullámfüggvénye koordináta reprezentációban. A skalárszorzatot koordináta reprezentációban a

$$(\vec{\psi}, \vec{\phi}) = \int d\Omega \cdot \psi^*(x, y, z) \phi(x, y, z) \quad (91)$$

integrállal számíthatjuk ki.

Az $\vec{e}_{p_x p_y p_z}$ vektor hullámfüggvénye koordináta reprezentációban a következő (v.ö. (40)-el):

$$e_{p_x p_y p_z}(x, y, z) \equiv (\vec{e}_{xyz}, \vec{e}_{p_x p_y p_z}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z)} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}. \quad (92)$$

Ezek a $\vec{p} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ impulzus operátor deltára normált sajátfüggvényei.

67.Feladat: Igazoljuk ezt az állítást.

Igazolás: A \hat{p}_x operátor sajátértékegyenlete koordinátaképpen

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} e_{p_x p_y p_z}(x, y, z) = p_x \cdot e_{p_x p_y p_z}(x, y, z).$$

A (92) ennek eleget tesz. A deltára normáltság (44) segítségével látható be. ♣

Az $U(x, y, z)$ erőfüggvény erőterében mozgó tömegpont Hamilton-operátora

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + U(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}).$$

Az időtől függő Schrödinger-egyenlet (61) vektoriális alakja most is érvényes. Koordináta reprezentációban azonban ez már nem (65) alakú, hanem

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + U(x, y, z) \psi,$$

amelyben $\psi = \psi(x, y, z, t)$. A ∇ operátor felhasználásával ez az egyenlet a tömörebb

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi \quad (93)$$

alakba írható át.

A Schrödinger-egyenlet koordináta reprezentációbeli alakja (71) helyett

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) + U\psi(x, y, z) = E \cdot \psi(x, y, z). \quad (94)$$

Speciálisan szabad mozgásnál ($U = 0$) a (92) sajátfüggvények a Schrödinger-egyenletet is kielégítik $E = \frac{p^2}{2m}$ -el. Ha az időfüggésüket is figyelembe vesszük, az

$$e_{p_x p_y p_z}(x, y, z, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

de Broglie hullámot kapjuk, amelyben $\vec{k} = \frac{1}{\hbar} \vec{p}$ és $\omega = \frac{1}{\hbar} E$. Ezekből a síkhullámokból hullámcsomag képzéssel kaphatunk fizikailag realizálható (normált) állapotokat, de — mint a 32.fejezetben mondtuk — amikor a hullámcsomag képzésen nincs kifejezett hangsúly, a síkhullámot tekintjük a szabad tömegpont hullámfüggvényének.

Annak valószínűsége, hogy a tömegpontot az x, y, z koordinátájú pont $d\Omega$ környezetében találjuk meg, $w(x, y, z)d\Omega$ -val egyenlő. A Born-hipotézis szerint

$$w(x, y, z) = |\psi(x, y, z)|^2.$$

68.Feladat: Adjuk meg a 2.feladat kvantummechanikai megoldását.

Megoldás: Ez a feladat a 39.fejezetben tárgyalt egydimenziós végtelen potenciálgödör háromdimenziós általánosítása. A Schrödinger-egyenletben a rugalmasan visszaverő falnak végtelen potenciálugrás felel meg, és a hullámfüggvény az $U = \infty$ tartományban és annak határán (a falnál) zérus, a hullámfüggvény *deriváltjának* azonban nem kell folytonosnak lennie a határon.

A feladat tehát az, hogy a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

szabad Schrödinger-egyenlet olyan megoldását keressük meg a $-a/2 < x < a/2$, $-b/2 < y < b/2$, $-c/2 < z < c/2$ tartományban, amely a tartomány határain eltűnik.

A feladat a változók szeparálásával oldható meg. Keressük ψ -t a

$$\psi(x, y, z) = \alpha(x) \cdot \beta(y) \cdot \gamma(z)$$

szorzat alakjában. Helyettesítsük ezt az egyenletbe, és osszuk végig az egyenletet az $\alpha \cdot \beta \cdot \gamma$ szorzattal. A ∇^2 ismert kifejezését figyelembe véve az alábbi egyenletre jutunk:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\alpha(x)} \frac{\partial^2 \alpha(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{\beta(y)} \frac{\partial^2 \beta(y)}{\partial y^2} + \frac{1}{\gamma(z)} \frac{\partial^2 \gamma(z)}{\partial z^2} \right) = E.$$

A jobboldal x, y, z -től független konstans, a baloldal egyes tagjai rendre x, y, z függvényei, ezért az egyenlet csak úgy teljesülhet, ha ezek a tagok maguk valamilyen A, B, C konstansokkal egyenlők:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \alpha(x)}{dx^2} = A\alpha(x) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \beta(y)}{dy^2} = B\beta(y) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \gamma(z)}{dz^2} = C\gamma(z)$$

$$A + B + C = E.$$

Behelyettesítéssel könnyen meggyőződhetünk róla, hogy a korrekt $\alpha(\pm a/2) = 0$ határfeltételt kielégítő $\alpha(x)$ függvények és a hozzájuk tartozó sajátenergiák azonosak az egydimenziós végtelen potenciálgödör 39. fejezetben talált sajátfüggvényeivel és sajátenergiáival a különbséggel, hogy az ottani E -nek A felel meg. Célszerű továbbá a 39§-beli n kvantumszámot n_x -re átjelölni. Ekkor $\alpha(x)$ az $e_{n_x}(x)$ függvények valamelyikével lehet egyenlő, és adott n_x kvantumszám mellett az A értéke

$$A_{n_x} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n_x^2.$$

A feladat szimmetriájából nyilvánvaló, hogy a $\beta(y), \gamma(z)$ megoldások ugyanilyen típusúak, egy n_y ill. n_z kvantumszám fogja jellemezni őket, amelyek egymástól és n_x -től függetlenül választhatók. Ezenkívül A -t B -vel, ill. C -vel kell helyettesíteni. Így végülis a háromdimenziós dobozba zárt tömegpont energiasajátfüggvényei a következők:

$$e_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = e_{n_x} \cdot e_{n_y} \cdot e_{n_z},$$

ahol a jobboldal egyes tényezőit (90) adja meg, az n_x, n_y, n_z bármilyen nullánál nagyobb egész szám és az adott kvantumszám-hármmal jellemzett sajátállapotban az energia értéke

$$E_{n_x n_y n_z} = A_{n_x} + B_{n_y} + C_{n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{n_x}{a} \right)^2 + \left(\frac{n_y}{b} \right)^2 + \left(\frac{n_z}{c} \right)^2 \right].$$

Ezek a sajátértékek azonosak a 2.feladatban a Bohr-Sommerfeld modell alapján kapott sajátértékekkel annak ellenére, hogy a két megoldási eljárás gyökeresen különböző: a Bohr-Sommerfeld modell a tömegpontok mechanikáján, a kvantummechanikai megoldás a Schrödinger-egyenleten alapul, amely egy hullámeqyenlet. A két módszerrel kapott megoldás között az egyedüli különbség az, hogy a korrekt kvantummechanikai megoldás szerint egyik kvantumszám sem lehet zérus. A legalacsonyabb sajátérték tehát E_{111} , ez a dobozba zárt tömegpont zéruspont energiája.♣

69.Feladat: Adjuk meg a 4.feladat kvantummechanikai megoldását

Gondolatmenet: Az izotróp harmonikus oszcillátor

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}Dr^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{1}{2}D(x^2 + y^2 + z^2)$$

Hamilton-operátora három tag összege, amelyek mindegyike csak az egyik koordinátától függ, és az egyes tagok az egydimenziós lineáris harmonikus oszcillátor Hamilton-operátorai. Ennek következtében a változók szeparálásával a megoldás felírható az egydimenziós oszcillátor sajátfüggvényein és sajátértékein keresztül. ♣

3.41. Az időtükrözött mozgás

A klasszikus mechanikában a tömegpont *időtükrözött mozgásán* azt a mozgást értjük, amelynek során a test fordított irányban halad végig az eredeti mozgás pályáján úgy, hogy a pálya minden pontjában a sebessége ugyanolyan nagyságú és ellentétes irányú, mint amilyen az eredeti mozgásban volt. Ha az eredeti mozgást lefilmezzük és a filmet a végénél kezdve vetítjük le, az időtükrözött mozgást látjuk: a szabadesés időtükrözöttje például a függőleges hajítás (emelkedő szakasza). Az időtükrözött mozgásra történő áttérés műveletét *időtükrözésnek* nevezzük³³.

Legyen az eredeti mozgás trajektóriája

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

az időtükrözött mozgásé pedig

$$x = f_T(t) \quad y = g_T(t) \quad z = h_T(t).$$

Az időtükrözés fogalmából következik, hogy

$$f_T(t) = f(-t) \quad g_T(t) = g(-t) \quad h_T(t) = h(-t).$$

A Newton-egyenletek alapján könnyen belátható, hogy ha az erő nem függ explicite az időtől és az eredeti mozgás trajektóriája eleget tett ezeknek az egyenleteknek, akkor az időtükrözött mozgás trajektóriája is kielégíti őket: a newtoni-mechanika *invariáns az időtükrözéssel szemben*. Az invariancia lényegében azon múlik, hogy a Newton-egyenletekben a trajektóriák *második* időbeli deriváltja — a gyorsulás — szerepel, és a gyorsulás az eredeti és az időtükrözött mozgás azonos koordinátájú pontjaiban megegyezik egymással (gondoljunk a szabadesés és a függőleges hajítás példájára).

A bizonyítás egyszerűsítése érdekében tegyük fel, hogy a mozgás a z -tengely mentén történik az $m\ddot{z} = F(z)$ Newton-egyenlet szerint. Legyen $z = h(t)$ az egyenlet egy megoldása:

$$m\ddot{h}(t) = F[h(t)], \tag{95}$$

³³Az elnevezés félrevezető, mert nem az időt, hanem a mozgást tükrözzük.

és mutassuk meg, hogy ennek következtében $h_T(t) = h(-t)$ is eleget tesz ugyanennek az egyenletnek: $m\ddot{h}_T(t) = F[h_T(t)]$.

A fejezethez fűzött függelékben megmutatjuk, hogy bármely $h(t)$ függvényre

$$\dot{h}_T(t) = -\dot{h}(t), \quad \ddot{h}_T(t) = +\ddot{h}(t), \quad (96)$$

tehát a bizonyítandó egyenlet $m\ddot{h}(-t) = F[h(-t)]$ alakban is írható. De ez az egyenlet valóban teljesül, hiszen nem más, mint (95) a $-t$ pillanatban.

A kvantummechanikában a mozgást a $\psi(x, y, z, t)$ hullámfüggvény időbeli változása határozza meg. Jelöljük az időtükrözött mozgás hullámfüggvényét $\psi_T(x, y, z, t)$ -vel. Azt gondolnánk, hogy $\psi_T(x, y, z, t) = \psi(x, y, z, -t)$, de ez nem igaz: ha $\psi(x, y, z, t)$ eleget tesz az időfüggő Schrödinger-egyenletnek, az így definiált $\psi_T(x, y, z, t)$ nem elégíti ki azt, ezért nem ír le lehetséges mozgást³⁴.

Ez azért van így, mert a (93) időfüggő Schrödinger-egyenletben a $\psi(t)$ első időderiváltja fordul elő. Induljunk ki abból, hogy $\psi(t)$ eleget tesz ennek az egyenletnek és nézzük meg, mi jön ki ebből a $\psi_T(t)$ időderiváltjára nézve.

Legyen tehát

$$i\hbar\dot{\psi}(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(t) + U\psi(t). \quad (97)$$

Mivel feltevés szerint ez az egyenlet minden időpillanatban teljesül, érvényes lesz a $-t$ pillanatban is:

$$i\hbar\dot{\psi}(-t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(-t) + U\psi(-t). \quad (98)$$

Ha $\psi_T(t) = \psi(-t)$, ahogy feltettük, akkor (96) első egyenlete szerint az utolsó egyenlet

$$-i\hbar\dot{\psi}_T(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_T(t) + U\psi_T(t). \quad (99)$$

alakban írható, és ez a baloldali mínusz miatt *nem azonos* a (97) dinamikai egyenlettel.

Vegyük azonban figyelembe, hogy a Born-hipotézis szerint nem maga $\psi(t)$ az, ami meghatározza a megfigyelések eredményét, hanem a $|\psi(t)|^2$ mennyiség, amelyben szimmetrikusan szerepel ψ és komplex konjugáltja. Ennek az abszolút érték négyzetnek kell az időtükrözött mozgásban fordított időrendben változnia. Az időtükrözött mozgás fogalmával ezért összefér, hogy az időtükrözött mozgás hullámfüggvényén a $\psi(-t)$ komplex konjugáltját értsük:

$$\psi_T(x, y, z, t) = \psi(x, y, z, -t)^*. \quad (100)$$

Ezen definíció mellett (98)-t az (99) helyett a

$$-i\hbar\dot{\psi}_T^*(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_T^*(t) + U\psi_T^*(t)$$

³⁴A továbbiakban a hullámfüggvények argumentumában nem írjuk ki a koordinátákat, mert ebben a fejezetben nem játszanak szerepet.

alakban írhatjuk. Komplex konjugálás után az

$$i\hbar\dot{\psi}_T(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_T(t) + U\psi_T(t)$$

egyenletre jutunk, ami a $\psi_T(t)$ -re vonatkozó időtől függő Schrödinger egyenlet.

Ez az egyenlet bizonyítja, hogy a kvantummechanika — a klasszikus mechanikához (és elektrodinamikához) hasonlóan — szintén invariáns az időtükrözéssel szemben. A kvantummechanika időtükrözési invarianciáját ki fogjuk használni annak az interferencia-kísérletnek az analizésénél, amely a de Broglie hullámok létezését demonstrálja.

70.Feladat: Határozzuk meg a \vec{p} impulzusú de Broglie hullám időtükrözöttjét.

Megoldás: A $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ impulzusú deBroglie hullám hullámfüggvénye a következő:

$$e_{p_x p_y p_z}(x, y, z, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}.$$

Komplex konjugálva és ezt követően a t előjelét megváltoztatva kapjuk az időtükrözött hullámfüggvényt:

$$e_{p_x p_y p_z T}(x, y, z, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i(-\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)},$$

ami egy $-\vec{p}$ impulzussal mozgó szabad részecske hullámfüggvénye³⁵. Ez az eredmény összhangban van az időtükrözés fogalmával.♣

Függelék.

Az időderivált a

$$\dot{h}(t) = \begin{cases} \frac{h(t + \Delta t) - h(t)}{\Delta t} \\ \frac{h(t) - h(t - \Delta t)}{\Delta t} \end{cases} \quad (\Delta t > 0)$$

egyenletek bármelyike a $\Delta t \rightarrow 0$ limeszben. A felső egyenlet szerint

$$\dot{h}_T(t) = \frac{h_T(t + \Delta t) - h_T(t)}{\Delta t}.$$

De $h_T(t) = h(-t)$, ezért

$$\dot{h}_T(t) = \frac{h(-t - \Delta t) - h(-t)}{\Delta t} = -\frac{h(-t) - h(-t - \Delta t)}{\Delta t} = -\dot{h}(-t),$$

³⁵Komplex konjugálás nélkül az exponens ωt -t tartalmazó tagja is előjelet vált, aminek következtében a hullámfüggvény már nem elégíti ki az időfüggő Schrödinger-egyenletet.

az (96) első egyenletével összhangban.

A második derivált a

$$\ddot{h}(t) = \frac{h(t + \Delta t) - 2h(t) + h(t - \Delta t)}{(\Delta t)^2} \quad (\Delta t > 0)$$

limesze, ahonnan

$$\begin{aligned} \ddot{h}_T(t) &= \frac{h_T(t + \Delta t) - 2h_T(t) + h_T(t - \Delta t)}{(\Delta t)^2} = \frac{h(-t - \Delta t) - 2h(-t) + h(-t + \Delta t)}{(\Delta t)^2} = \\ &= \frac{h(-t + \Delta t) - 2h(-t) + h(-t - \Delta t)}{(\Delta t)^2} = \ddot{h}(-t). \end{aligned}$$

Ez (96) második egyenlete.

Áttérünk a de Broglie hullámok létezését bizonyító kísérlet ismertetésére. Előké-szítésként a fény és a Röntgen-sugarak interferenciáját tekintjük át.

3.42. Az optikai interferencia

A XVIII.század folyamán nem sikerült dönteni a fény korpuszkuláris és hullám felfo-gása között. A hullámfelfogás győzelmét az *interferencia* felfedezése hozta meg.

Az alapjelenség a Young-kísérlet (Young 1801, 15. bra). Amikor a rések keskenyek, a 3.ernyőn a képük (Q_1R_1 és Q_2R_2) szétterül és a Q_1Q_2 tartományban átfedődik egy-mással. Az átfedési tartományban *interferenciakép* alakul ki, megvilágított és sötét csíkok (interferenciacsíkok) váltakoznak egymással.

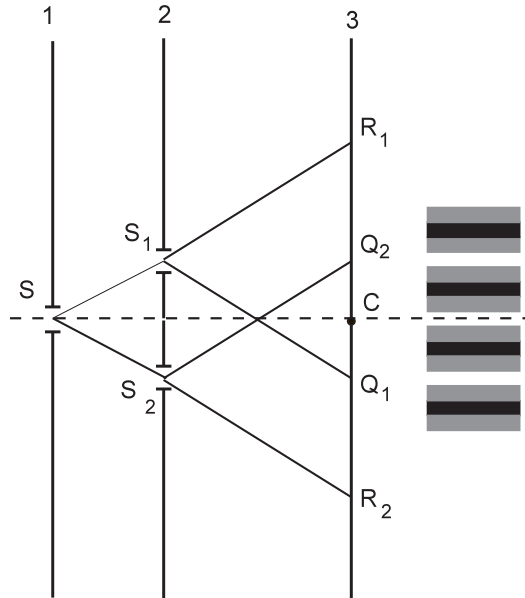
Az *interferencia-triád*:

1. Amikor mindkét rés (S_1 és S_2) nyitva van, a Q_1Q_2 szakaszon található olyan P pont, amelyik nincs megvilágítva.
2. Ha S_2 -t lefedjük (S_1 nyitva marad), a megvilágítottság a Q_1R_1 tartományban folytonos és P megvilágítottá válik.
3. Ha az S_1 -t fedjük le (nyitott S_2 mellett), a megvilágítottság a Q_2R_2 tartományban folytonos és P újra megvilágított.

Összefoglalva: Van olyan pont az ernyőn, amelynek a megvilágítottsága *nő* attól, hogy az egyik rést *lefedjük* (vagy *csökken* attól, hogy mindkettőt *kinyitjuk*).

Probáljuk megérteni ezt a jelenséget a fény részecske-felfogása alapján. Egy ré-szecske — a fogalmából következően — minden pillanatban lokalizálva van a saját

térfogatára, ezért azoknak a részecskéknek a pályája, amelyek — mondjuk — az S_1 résen haladnak át, nem függhet attól, hogy S_2 le van-e zárva vagy sem. Az S_1 -n áthaladó részecskék egy része P -be jut és megvilágítottá teszi azt. Hogyan *szűnhetne meg* ez a megvilágítottság attól, hogy az S_2 -t *is kinyitjuk*?



15. ábra.

Ha az S_2 lefedésére használt anyag valahogy hatna az S_1 -n áthaladó részecskékre, ez talán magyarázhatná a jelenséget. De ez a „magyarázat” ellentmond annak a ténynek, hogy egy anyagdarab semmilyen észrevehető hatást sem gyakorol arra a fény-sugárra, amely bizonyos távolságban halad el mellette. Komolyabb az a próbálkozás, amely a fényrészecskék egymásra hatása alapján kísérelné meg az interferencia-triád megértését: amikor mindkét rés nyitva van, a két nyaláb részecskéi hatnak egymásra és ez a hatás „szorítja ki” a fényt a P pontból. Ha ez a magyarázat igaz volna, az interferenciacsíkoknak fokozatosan ki kellene egyenlítődniük, ahogy egyre gyengébb és gyengébb nyalábot használnánk fel (de természetesen egyre hosszabb és hosszabb megvilágítási idővel³⁶). A tapasztalat szerint ez a gyengülés egyáltalán nem következik be: *az interferenciakép jellege független a nyaláb intenzitásától*, akkor is létrejön, ha a nyaláb olyan gyenge, hogy a kísérleti berendezésben sohasem tartózkodik egynél több „részecske”.

A részecske-képpel szemben a hullámfelfogás számára az interferencia nem jelent problémát: amikor mindkét rés nyitva van, az S_1 -ből és az S_2 -ből kiinduló résznya-

³⁶Az interferenciakép lefényképezésénél alkalmazott expozíciós időről van szó.

lábok az ernyőn felváltva erősítik és gyengítik egymást az optikai útkülönbségüktől (fáziskülönbségüktől) függően. Az analízisünket ezért a hullámfelfogás alapján folytatjuk.

Az interferencia létrejöttének feltételei a Young-kísérletben a következő négy pontban foglalhatók össze: 1. diffrakció, 2. szuperpozíció elv, 3. monokromatikusság és 4. koherencia.

A diffrakció (fényelhajlás) abban nyilvánul meg, hogy — a geometriai optika követelményével ellentétben — a tárgyak árnyéka és a rések képe elmosódott, a megvilágítottság a szélükön fokozatosan csökken a maximálisról nullára. A diffrakció maga is a hullámtermészet következménye. Az interferencia-kísérletben a diffrakció azért lényeges, mert nélküle a résznyalábok nem fedődnének át.

A szuperpozíció elv azt mondja ki, hogy (forrásmentes térrészben) a szabadon terjedő hullámok szuperpozíciója is lehetséges mozgás. Ennek az elvnek a következménye az, hogy az ernyő pontjaiban a résznyalábok — előjelüket is figyelembe véve — összeadódnak.

A harmadik és a negyedik követelmény azért szükséges, hogy az ernyő egyes pontjaiban a fáziskülönbség értéke a kísérlet folyamán állandó legyen. Ha ez a feltétel nem teljesül, egy adott kísérleten belül minden pontban kioltás és erősítés váltakozik egymással, és ez az interferenciakép elmosódását okozza.

Nyilvánvalóan ez történik, ha a fény nem monokromatikus, vagyis a hullámhossza változó érték. De ugyanez az elmosódás monokromatikus nyalábnál is bekövetkezik, ha az S_1 és az S_2 részből kiinduló résznyalábok *kezdeti* fáziskülönbsége nem állandó érték. Ha pl. a réseket két független izzóval helyettesítenénk, interferenciakép még akkor sem jönne létre, ha az izzók fényéből színszűrővel kiválasztanánk egy határozott frekvenciájú (monokromatikus) komponenst. Az izzók fénye ugyanis az egyes atomjaik által kibocsátott hullámvonulatokból áll össze. Mivel az izzók — sőt, az egyes atomok bennük — függetlenek, az ernyőn szuperponálódó résznyalábok relatív fázisa pillanatról pillanatra változik és ez tökéletesen összemossa az interferenciaképet.

A résznyalábokat akkor nevezzük *koherensnek*, ha a fáziskülönbségük állandó. Ezt úgy lehet biztosítani, ha mindkettőt ugyanannak az atomnak a hullámvonulatából állítjuk elő. A Young-kísérletben a közös fényforrás az S rés, amely a balról ráeső fényt a diffrakció következtében szétteríti. Ha a berendezés mechanikailag kellően stabil (az optikai úthosszak állandók), akkor ezzel a trükkkel biztosítani lehet az S_1 és az S_2 résnek, mint fényforrásoknak a koherenciáját.

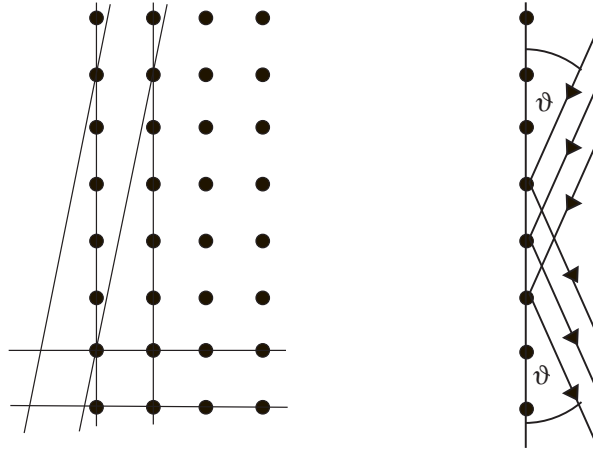
Nyilvánvaló, hogy a koherencia hiánya és a teljes koherencia között fokozatok lehetnek, és van értelme beszélni a koherencia mértékéről. Ennek mennyiségi mérőszáma az interferenciakép élességet kifejező

$$K = \frac{I_{max} - I_{min}}{I_{max} + I_{min}}$$

kontrasztosság. Az I_{max} és I_{min} a maximális és a minimális megvilágítottság. Optimális esetben $K = 1$, a sötét részek megvilágítottsága ekkor zérus, a koherencia teljes. A koherencia csökkenésének $K \rightarrow 0$ felel meg.

A kontrasztosságot azzal lehet fokozni, hogy két rés helyett szabályos résrendszert alkalmazunk (optikai rács). Az optikai kép teljes intenzitása természetesen arányos a rések N számával, de ami fontosabb, ez az N -szeres intenzitás nyereség nem egyenletesen oszlik el: az intenzitás a maximumokban N^2 -el arányosan nő meg, a minimumokban — ennek megfelelően — az N -szeresnél kevesebbet nő. A következmény a kontrasztosság növekedése, ami az interferometrikus alkalmazásoknál nagy előny.

Elvi szempontból azonban az eljárásnak hátránya az, hogy ráccsal nem lehet elvégezni az interferencia-triád mindhárom kísérletét. Márpedig ha az interferenciát arra akarjuk felhasználni, hogy a mikroobjektumok részecskeszerűségét vegyük vizsgálat alá, akkor mindhárom kísérletre szükség van, nem helyettesíthetjük őket annak a *feltételezésével*, hogy *mi lenne, ha* az egyik vagy a másik rést letakarnánk. A neutronokkal elvégzett modern interferenciakísérletek — mint látni fogjuk — valóban kiterjednek a triád mindhárom elemére.



16. ábra.

De térjünk vissza a Young-kísérlethez. Szimmetrikus elrendezésben az ernyő középvezetékében maximum van. A következő maximum helye attól függ, hogyan aránylik a λ hullámhossz a rések közötti a távolsághoz. Ha $a \gg \lambda$, az interferenciacsíkok olyan sűrűn követik egymást, hogy a fotolemez nem képes felbontani őket. Ha — éppen ellenkezőleg — $a \ll \lambda$, akkor a következő maximum olyan távol lehet középvezetékétől, hogy kikerül a berendezés látóteréből. Nyilvánvaló, hogy az interferencia megfigyelése szempontjából az optimális eset az, amikor a rések közötti távolság ugyanolyan nagyságrendű, mint a hullámhossz. Ez a konklúzió a ráccsal végzett megfigyelésekre is érvényes (a a rácsállandó).

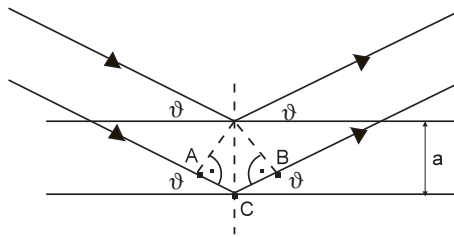
A látható fény hullámhossza $0.5 - 1 \mu m$, ilyen állandójú rácsot fototechnikai eljárással lehet készíteni. A röntgen-sugárzás hullámhossza ($0.001 - 1 nm$) ennél sokkal kisebb, mesterségesen nem is lehet olyan optikai rácsot készíteni, amelynek az állandó-

ja ebbe a tartományba esik. Szerencsére a természet gondoskodik megfelelő rácsról: a szabályos kristályok betölthetik az optikai rács funkcióját és a rácsávolságuk 0.1 nm körüli (Laue 1912).

A diffrakció matematikai elméletében megmutatják, hogy egy szabályos kristályrács azonos helyzetű *rácssíkjai* (ld. a 16. ábrát) síktükör-rendszernek tekinthetők, amelyek mindegyike a beesési szöggel azonos szögben veri vissza a sugárzást. Ez a rácssík-rendszer az optikai rács analogonja: az egyes síkok felelnek meg az egyes réseknek. A szomszédos síkok által visszavert hullámok akkor erősítik egymást, ha teljesül a

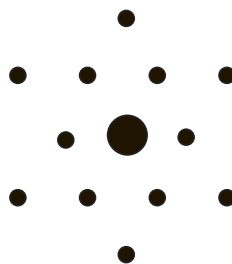
$$2a \cdot \sin \vartheta = n\lambda \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Bragg-feltétel, ami azt fejezi ki, hogy az egyes tükrökről visszavert sugár optikai útkülönbsége (az *ACB* szakasz hossza a 17. ábrán) λ egész számú többszöröse. A képletben a a "tükrök" közötti távolság, ϑ a beesési szög, amely egyenlő a visszaverődés szögével.



17. ábra.

A kristálysík \longleftrightarrow síktükör megfeleltetés annál jobb, minél sűrűbben helyezkednek el az atomok a kiválasztott kristálysíkban. Nyilván vannak olyan „nagyon ferde” helyzetű síkok, amelyekben csak elszórtan található atomok — az ilyen síkok a sugárzás visszatükrözése szempontjából nem effektívek. Ezért praktikusán csak arra a néhány síkseregire kell gondolnunk, amelyekben az atomok sűrűsége a legnagyobb.



18. ábra.

Egyetlen tükörnél ϑ tetszőleges lehet, interferencia-maximum azonban csak a Bragg-feltételt kielégítő szögeknél lép fel. Ha egy adott helyzetű egykristályra véletlenszerűen választott irányból ejtünk monokromatikus röntgensugárzást, a beesési irány általában nem fog a Bragg-feltétel által meghatározott szöget bezárni egyik effektív kristálysíkrendszerrel sem és interferenciakép nem jön létre. Ebben a kísérletben tehát célszerű eltekinteni a monokromatikusságtól. Ha olyan nyalábot használunk, amely mindenféle hullámhosszat tartalmaz valamilyen intervallumon belül, akkor minden effektív kristálysíkra és beesési irányra lesz a nyalábban olyan hullámhossz, amely teljesíti a Bragg-feltételt. Az interferencia maximumok jellegzetes képet adnak a fotolemezen (ld. a 18. ábrát), amelynek az alapján meg lehet határozni a kristályszerkezetet. A nagy folt közepén a szóródás nélkül áthaladt beeső sugárzás nyoma. Az interferencia létrejötte volt az első bizonyíték arra, hogy a röntgensugárzás hullámtermészetű.

3.43. A de Broglie hullámok interferenciája kristályrácsos

A 3.32 fejezetben láttuk, hogy a szabadon mozgó részecskék hullámfüggvénye $k = \frac{p}{\hbar}$ hullámvektorú, vagyis $\lambda = \frac{h}{mv}$ hullámhosszú síkhullám. Az elektron hullámtermészetének és a $\lambda = \frac{h}{mv}$ képletnek az ellenőrzésére de Broglie azt javasolta, hogy elektronokkal is végezzenek el olyan interferenciakísérletet, mint a röntgensugarakkal. Ehhez az szükséges, hogy az elektron de Broglie hullámhossza nagyságrendileg egyezzen meg a kristály rácsállandójával (kb. 0.1 nm).

71. Feladat: Írjuk fel azt a képletet, amelynek segítségével kiszámíthatjuk az elektron és a neutron de Broglie hullámhosszát nanométerben, ha ismerjük a mozgási energiájukat elektronvoltban.

Megoldás:

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mK}}.$$

A számlálót és a nevezőt célszerű c -vel szorozni, mert az mc^2 nyugalmi energia az, amit elektronvoltban (ami a munka egysége) adhatunk meg:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{\sqrt{2mc^2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{K}}.$$

A képletben

$$\begin{aligned} m_e c^2 &\approx 0.5 \text{ MeV} = 0.5 \times 10^6 \text{ eV} \\ m_n c^2 &\approx 1000 \text{ MeV} = 10^9 \text{ eV}, \end{aligned}$$

valamint $\hbar c \approx 200 \text{ eV} \cdot \text{nm}$. Ezek alapján

$$\lambda_e \approx \frac{2\pi \cdot 200}{\sqrt{10^6}} \cdot \frac{1}{\sqrt{K}} = \frac{0.4\pi}{\sqrt{K}}$$

$$\lambda_n \approx \frac{2\pi \cdot 200}{\sqrt{20 \cdot 10^8}} \approx \frac{0.028}{\sqrt{K}}.$$

Ezekben a képletekben $[\lambda] = \text{nm}$, $[K] = \text{eV}$. ♣

$\lambda_e = 0.1 \text{ nm}$ -nek kb. $K \approx 160 \text{ eV}$ felel meg, vagyis ha 160 V feszültséggel gyorsítunk fel nyugvó elektronokat, a hullámhosszuk nagyságrendileg a rácsállandóval lesz egyenlő. Ezeket az elektronokat kristályrácsra szórva — de Broglie hipotézise szerint — interferencia-csúcsokat kell kapnunk, amelyek ugyanolyan jellegzetes képet adnak, mint amit Laue kapott a röntgensugarak segítségével (18. ábra).

De Broglie dolgozatának az ismertté válása után (1923) derült ki, hogy egy korábbi kísérletben (Davisson és Kunsman 1921), amelyben elektronok szóródását vizsgálták nikkelen, már tapasztaltak ilyen csúcsokat, de megmagyarázni nem tudták őket. Később G.P. Thomson speciális diffrakációs kísérletekben demonstrálta az elektron *hullámtermészetét*, és ezért 1937-ben Davissonnal együtt Nobel-díjjal jutalmazták. Apja, J.J. Thomson 1906-ban viszont azért részesült Nobel-díjban, mert megmutatta, hogy az elektromosság atomjai azok a *részecskék*, amelyeket elektronoknak nevezünk³⁷.

3.44. A neutronok

A kristályráccsal végzett kísérletekben nem lehetséges az interferencia-triád mindhárom kísérletét elvégezni, mert a résznyalábok száma nagyon nagy (az atomok felelnek meg a réseknek, mert ők „terítik szét” a hullámot diffrakció révén) és nem is lehet bizonyosakat letakarni közülük. Ennek az a következménye, hogy az ilyen kísérletek a Young-kísérletnél *közvetettebb* bizonyítékát nyújtják annak, hogy a beeső nyaláb nem állhat részecskékből. *Fel kell tenni*, hogy ez a nyaláb bizonyos hullámhosszakat tartalmazó hullám, a diffrakció-elmélet segítségével *ki kell számítani*, hogy az adott szerkezetű kristályrács mellett milyen irányban várhatók interferencia-maximumok, és ha a kísérlet ezt igazolja, akkor mondhatjuk, hogy a nyaláb hullámtermészetű, mert nagyon valószínűtlen, hogy részecskékből állónak feltételezve hasonló szórásképet lehetne kapni. Az interferencia-triád ehhez képest szinte „feltevések nélkül” képes demonstrálni, hogy egy nyaláb nem állhat részecskékből. A részecskeszerűség fogalmát kell felhasználni (azt, hogy egy részecske nem lehet egyidejűleg a tér egymástól távoli pontjaiban) és tudni kell fokozatosan „gyengíteni” a nyalábot. A kísérlet *interpretációjához* nincs szükség a diffrakcióelmélethez hasonló bonyolultságú matematikai teóriára.

Érhető ezért, hogy a kísérleti fizikusok keresték a módját, hogy részecskékkal is tudjanak Young-típusú kísérletet végezni és ez a törekvésük sikerrel járt. A hatvanas évek közepére kifejlesztettek egy nagyszerű eszközt, az u.n. *háromfűlű interferométert*

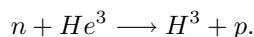
³⁷A harmadik híres fizikus Thomstont Lord Kelvin néven ismerjük.

(Bonse és Hart 1965), amelynek a segítségével 1974 óta tanulmányozzák a neutronnyalábok interferenciáját. Ez a módszer is kristályrácsot használ, de oly módon, hogy két jól elkülönülő koherens résznyaláb jön létre. Az alábbiakban ezekről a kísérletekről lesz szó.

A kísérleteket — mint mondtuk — neutronokkal végzik. A neutron az elektronnál kb. 2000-szer nehezebb, elektromosan semleges részecske. A vele kb. azonos súlyú protonnal az atommagok építőköve. A különböző elemek atommagjai a protonok számában különböznek, a *rendszám* az atommagban lévő protonok számával egyenlő.

Egy adott elem *izotópjainak* az atommagjai a neutronok számában különböznek egymástól. A hidrogén atom magja (H^1) egyetlen protonból áll (a rendszáma 1). A hidrogén izotópjai a deutron (H^2 vagy D^2) és a trícium (H^3 vagy T^3), amelyeknek az atommagjában az egyetlen protonon kívül még egy, illetve két neutron is található.

A neutron részecske-volta abból látható, hogy az atommagokban a neutronok mindig *egészben* fordulnak elő. Magreakciókban az atommagok átalakulnak egymásba, és mindig egész neutronok vesznek részt bennük. A neutronok észlelése is magreakció segítségével történik. Ha pl. a hélium atom He^3 izotópját (amelynek a magjában két proton és egy neutron van) neutronokkal sugározzuk be, trícium-magok jönnek létre és keletkezik egy proton is:



A végtermékek nyugalmi tömege kisebb, mint a kiinduló részecskéké, ennek következtében a proton kinetikus energiája nagy és fékeződése során ionizálja az útjába eső atomokat (a neutronok semlegesek, ezért maguk nem ionizálnak). Ez a jellegzetes mértékű ionizáció jelzi egy neutron beérkezését.

Megállapíthatjuk tehát, hogy *amikor a neutronokat észleljük, mindig részecskéket találunk*.

Az interferenciakísérletekben a neutronok két okból előnyösebbek az elektronokhoz képest. Mivel töltetlenek, nem hatnak rájuk Coulomb-erővel az anyag töltött részecskéi, és nagyobb tömegük miatt kisebb kinetikus energiával lehet elérni a rácsávolságnak megfelelő hullámhosszt (71.feladat). Mindkét tényező csökkenti a résznyalábok koherenciáját veszélyeztető perturbációkat.

A neutronokra — észrevehető mértékben — egyedül az atommagok protonjai és neutronjai hatnak a *magerők* révén. Ez nagyon rövid hatótávolságú erő, csak akkor hat a neutronra, ha érintkezésbe kerül az atommaggal. Ezek az erők okozzák a neutronok visszatükröződését a kristálysíkokról.

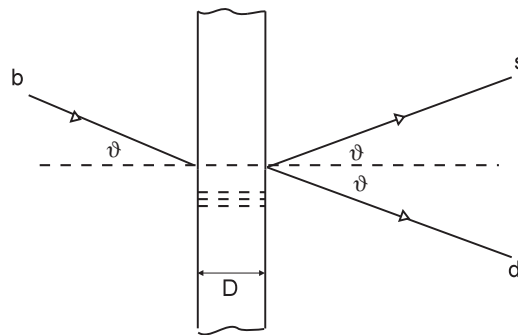
Most áttérünk a háromfülvű interferométer leírására.

3.45. A kristályrács hatása a neutronok terjedésére

A műszer alapeleme (a „fül”) egy szilícium egykristály lemez (ld. a 19.ábrát). Azok a kristálysíkok, amelyek — párhuzamos síktükrökként — az „aktív síkok” lesznek, a

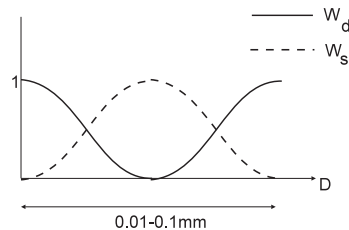
lemez oldallapjára merőlegesek (az ábrán vízszintes szaggatott vonalak jelzik a pozíciójukat). A síkok közötti a távolság 0.1 nm nagyságrendű.

A neutronok hullámhosszának ebbe a nagyságrendbe kell esnie. A neutronok legintenzívebb forrásai az atomreaktorok. Olyan neutronnyaláb vezethető ki belőlük, amelyben a neutronok energiája nagyságrendileg szobahőmérséklet körüli. Ez kb. 0.025 eV-nak felel meg, és a 71.feladat képlete alapján kb. 0.1 – 0.2 nm hullámhossz tartozik hozzá. Ez a becslés mutatja, hogy a reaktorokból nyerhető neutronok alkalmasak a kristályokkal végzett interferencia-kísérletekre.



19. ábra.

A neutronok a b -irányból (beesési irány) $\vartheta = 20 - 30^\circ$ szögben esnek rá a szilícium lemez oldallapjára (ld. a 19.ábrát). Az aktív kristálysíkok tükörként hatnak az olyan λ_a hullámhosszú neutronokra, amelyek az a rácstávolságnál a választott ϑ mellett kielégítik a Bragg feltételt. Az ilyen hullámhosszú neutronok egy része ϑ szögben, az s -irányban (szórt nyaláb iránya) visszaverődik.



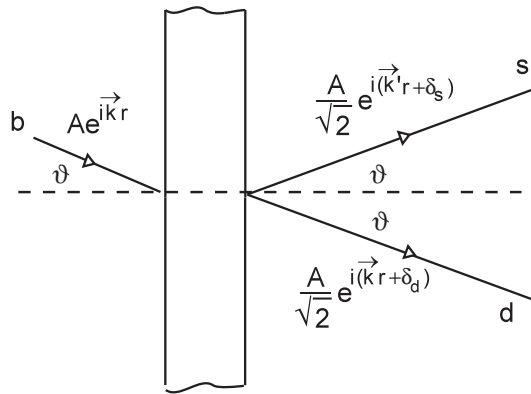
20. ábra.

Ha a lemezvastagsággal nullához tartunk ($D \rightarrow 0$), ez a rész egyre kisebb. Ebből azonban nem következik, hogy ha — megfordítva — a vastagságot mind nagyobbra választjuk, akkor egyre több és több lesz az s -irányba visszavert neutron, míg végül a d -irányban (direkt irányú nyaláb) egyetlen λ_a hullámhosszú neutron sem lép ki. Az

s -irányba visszavert neutronok ugyanis *szintén kielégítik a Bragg feltételt* és ezért mindaddig, amíg a lemezen belül vannak, újabb reflexiót szenvedhetnek. A többszörös reflexió következtében a szórt és a direkt irányban a W_s és a W_d találati valószínűség a D vastagság függvényében *periódikusan változik a nulla és az egy között* (a jelenséget szaknyelven *Pendellösung*nek nevezik, ld. a 20. ábrát). Az ingadozás periodicitása $0.01 - 0.1$ mm, ami jól mérhető, makroszkópikus hossz. A kísérletek szempontjából optimális lemezvastagság olyan, amelynél a szórt és a direkt nyalámban a találati valószínűség nagyjából egyforma. A továbbiakban az analízis egyszerűsítése kedvéért feltesszük, hogy $W_s = W_d$.

Mint látjuk, a „fűl” *nyalábosztó*ként funkcionál, mert két koherens résznyalábra bontja a beeső neutronnyalábot. A kvantumelmélet időtükrözési invarianciájából azonban következik, hogy az időtükrözött mozgást végző résznyalábokat *egyesíteni* fogja.

Vizsgáljuk meg részletesebben a „fűl” hatását az egyes nyalábok jüllámfüggvényére!



21. ábra.

A lemezen áthaladó neutron hullámfüggvénye egy hullámcsomag, amely a b irányból érkezik. A lemez mögött két hullámcsomag szuperpozíciójára hasad, amelyek egyike a szórt irányban, másika a direkt irányban mozog. Feltevés szerint a lemez felezi az intenzitást, ezért a kilépő résznyalábok amplitúdója a beeső nyaláb amplitúdójának az $1/\sqrt{2}$ -szerese.

A potenciállépcső tárgyalásánál (34. fejezet) azonban láttuk, hogy a hullámcsomagképet csak addig kell szem előtt tartanunk, ameddig tisztázzuk, hogy a Schrödinger egyenlet általános megoldásában fellépő konstansok közül melyiket kell nullának választani. Ezután már lehetséges (és célszerű) a hullámcsomagok helyett síkhullámokkal dolgozni. Ennek a felfogásnak megfelelően a lemezen kívül a hullámfüggvény a

következő:

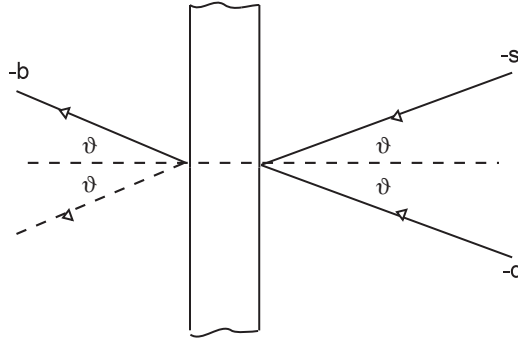
$$\psi(x) = \begin{cases} A \cdot e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} & \text{a } b\text{-nyaláiban} \\ \frac{A}{\sqrt{2}} \cdot e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{r} + \delta_s)} & \text{az } s\text{-nyaláiban} \\ \frac{A}{\sqrt{2}} \cdot e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} + \delta_d)} & \text{a } d\text{-nyaláiban.} \end{cases}$$

A közös $e^{-i\omega t}$ tényezőt elhagytuk. A \vec{k} vektor a beeső és a direkt nyaláb, \vec{k}' pedig a szórt nyaláb irányába mutat ($k = k'$). A δ_s és a δ_d azok a fázisok³⁸, amelyek a lemezen történő terjedés következtében jönnek létre.

A bemenő nyaláb hullámfüggvénye alapján tehát a következő szabály szerint írhatjuk fel a kimenő nyalábok hullámfüggvényét:

A szórt nyaláb hullámfüggvényének a felírásánál a hullámvektort helyettesítjük az új irány hullámvektorával és szorzunk az $\frac{1}{\sqrt{2}} \cdot e^{i\delta_s}$ tényezővel. A direkt nyaláb hullámfüggvényében a hullámvektor változatlan marad és az $\frac{1}{\sqrt{2}} \cdot e^{i\delta_d}$ -vel szorzunk.

Megmutatjuk, hogy az időtükrözési invariancia következményeként a két fázis különbsége $\pi/2$.



22. ábra.

Az időtükrözött mozgás hullámfüggvénye $\psi(x)^*$ -al egyenlő (a közös $e^{+i\omega(-t)} = e^{-i\omega t}$ elhagyása után). Ekkor két nyaláb esik rá a lemeze jobbról (a $-s$ és a $-d$ irányból), amelyeknek a hullámfüggvénye a $\psi(x)$ s és d irány menti részeinek a komplex konjugáltja. A lemezen történő áthaladás utáni hullámfüggvényeket ezekből az

³⁸Pontosabb lenne fázisállandóknak nevezni őket.

előbbi szabály alapján képezzük: szorzunk az $\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta_s}$, vagy az $\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta_d}$ faktoriall és irányváltoztatás esetén a hullámvektorokat helyettesítjük az új irány hullámvektorával.

Ennek az előírásnak a következtében az időtükrözött mozgásban az eredeti mozgás beesési egyenese mentén ($-b$ irányban) az

$$\left[\frac{A}{\sqrt{2}} e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} + \delta_s)} \right] \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_s} + \left[\frac{A}{\sqrt{2}} e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} + \delta_d)} \right] \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_d}.$$

hullámfüggvényű nyaláb lép ki (feltesszük, hogy A valós). Az összeg $A \cdot e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ -el egyenlő, ami a beeső hullám komplex konjugáltja. Az időtükrözési invariancia következtében ennek így is kell lennie. A lemez baloldalán lévő másik irány mentén (a $-s$ irány meghosszabbításában, az ábrán a szaggatott vonal) viszont a hullámfüggvénynek el kell tűnnie:

$$\left[\frac{A}{\sqrt{2}} e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{r} + \delta_d)} \right] \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_s} + \left[\frac{A}{\sqrt{2}} e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{r} + \delta_s)} \right] \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_d} = 0.$$

Egyszerűsítés után ez az egyenlet a

$$e^{i(\delta_s - \delta_d)} + e^{i(\delta_d - \delta_s)} = 0$$

egyenlőségre redukálódik, amelyben a két tag egymás komplex konjugáltja, ezért összegük csak akkor zérus, ha tiszta képzetesek. Mivel ráadásul fázisfaktorok, összegük eltűnésének feltétele

$$e^{i(\delta_s - \delta_d)} = +i \text{ vagy } -i,$$

azaz $\delta_s - \delta_d = \pm\pi/2$, ahogy állítottuk. A továbbiak szempontjából közömbös, melyik előjel érvényes. A Schrödinger-egyenlet alapján végzett részletes számítás az alsót adja, ezért válasszuk ezt:

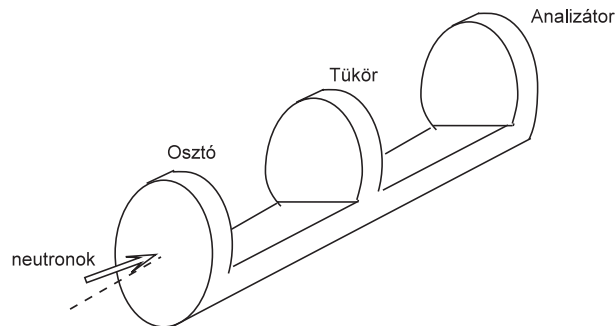
$$\delta_s = \delta_d - \frac{\pi}{2}.$$

Ennek az egyenletnek a tartalmát úgy is kifejezhetjük, hogy az eredeti mozgásban *a szórt nyaláb hullámfüggvénye $e^{-i\pi/2} = -i$ faktorban különbözik a direkt nyalábétól.* Az időtükrözött mozgásra nézve pedig az következik belőle, hogy *a két beeső nyaláb közül az változtat irányt, amelyik $+i$ szorzóban különbözik a másikkhoz képest.* Az előjelváltás az időtükrözéssel kapcsolatos komplex konjugálás következménye.

3.46. A háromfülű interferométer

Az interferométer lényege egy 8-10 cm hosszú, 2-3 cm átmérőjű szilícium *egy kristály* henger, amelyből a 23. ábrán látható háromfülű alakzatot vágják ki. A 24. ábra a felülnézetet mutatja. Ezen feltüntettük a résznyalábok hullámfüggvényeit is.

A baloldali fül, amelyre a reaktorból érkező nyaláb ráesik, az osztó, amely két — feltevésünk szerint egyenlő intenzitású — hullámra bontja a beeső hullámot. A középső fül a *tükör*, ami ugyancsak két-két részre osztja a ráeső nyalábokat, de a berendezés csak a szórt nyalábokat használja. A tükör funkciója a széttartó résznyalábok összetartóvá változtatása annak érdekében, hogy az interferenciájukat *analizálhassuk*. Ezt a harmadik fül végzi, amely analízátor funkciót lát el, mert a két különböző irányból érkező résznyaláb interferenciáját analizálhatjuk a segítségével.



23. ábra.

Könnyen meggyőződhetünk róla, hogy az analízátorhoz képest a neutron olyan mozgást végez, amelyik az osztóhoz viszonyított mozgás időtükrözöttje. Ehhez csupán azt kell észrevenni, hogy az analízátorra eső két résznyaláb relatív fázisa $\pi/2$ -vel egyenlő.

Valóban, az analízátorig megtett úton a felső résznyaláb (nevezzük ezt 1.-nek) eggyel több irányváltoztatást szenved, mint az alsó, ezért a hullámfüggvénye a 2. (alsó) nyaláb hullámfüggvényének a $-i$ -szerese.

Az analízátoron történő áthaladásra tehát alkalmazhatjuk az időtükrözött mozgásra vonatkozó korábbi szabályunkat. Eszerint az interferométer kimenetén lehetséges két (s és d) irány közül csak az egyik mentén fog a hullámfüggvény zérustól különbözni. Mivel a 2. nyaláb az, amelynek a hullámfüggvénye a másik $+i$ -szerese, ezért ez fog irányt változtatni, és csak a direkt irányban fognak neutronok kilépni ($W_d = 1$, $W_s = 0$).

Azt találtuk tehát, hogy az interferométer kimenetén csak a direkt irányban jelennek meg neutronok (a beesőknek a fele jut el ide, a másik fele a tükörnél kilép a berendezésből). Ugyanezt az eredményt természetesen a rajzon részletesebben feltüntetett hullámfüggvények segítségével, az időtükrözésre történő hivatkozás nélkül is megkaphatjuk.

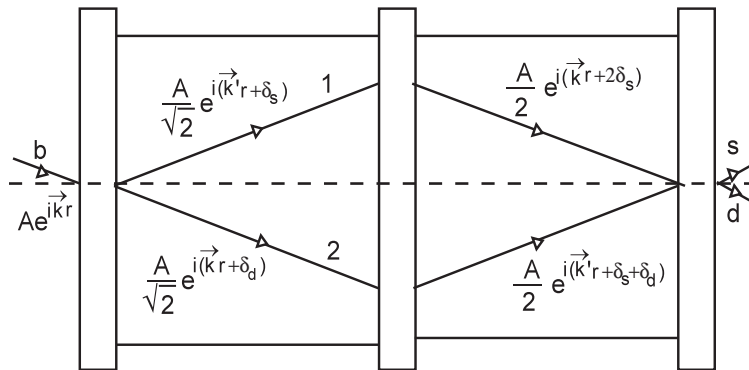
De mi lesz akkor, ha valamelyik belső utat letakarjuk kadmium lemezzel, ami nagyon erősen abszorbeálja a neutronokat? Az analízátor ekkor osztóvá válik, és ezért mindkét kimenő irányban egyenlő valószínűséggel találunk neutronokat.

Előttünk áll az interferencia triád tiszta formájában: attól, hogy az egyik utat

letakarjuk, a neutronok *megjelennek* abban az irányban is, amelyben korábban nem jelentkeztek. A letakarás nem jelent technikai problémát, mert a résznyalábok centiméternyire különülnek el egymástól. A jelenlegi reaktorok mellett automatikusan teljesül az is, hogy a beeső neutronok nagyon ritkán követik egymást, tehát interferenciájukat nem okozhatja kölcsönös egymásra hatásuk.

Ez a kísérleti eredmény mutatja, hogy *amikor nem észleljük őket, a neutronok nem viselkednek részecskeként*. A 44. fejezetben viszont láttuk, hogy amikor észleljük őket, mindig jól meghatározott pontban lokalizált részecskeként jelentkeznek. Ez a "kétszínűség" minden mikrorészecskére jellemző, és a *kettős természet*, vagy a *részecske-hullám dualizmus* nevet viseli. Újra aláhúzzuk, hogy ennek a következtetésnek a levonása az interferencia-triád demonstrálásával történik és nem igényel „elméletet”. Az eszköz *kigondolása és megtervezése* az, amihez kvantumelméletre — a kristályban mozgó neutronok Schrödinger egyenletének a megoldására — van szükség.

Ezen az alapkísérleten kívül az interferométer segítségével más kvantumelméleti paradoxonok is demonstrálhatók, és az eszközt fel lehet használni különféle, elsősorban magfizikai paraméterek nagypontosságú mérésére is.



24. ábra.

Válaszolnunk kell még arra a kérdésre, hogy miért kell az interferométert *egy-kristályból* készíteni. Ahhoz, hogy az analizátorhoz viszonyított mozgás az osztóhoz képesti mozgás időtükrözöttje legyen, valójában nem elegendő az, hogy a két analizátorra eső résznyaláb relatív fázisa $\pi/2$ -vel legyen egyenlő. Az is szükséges hozzá, hogy az analizátor kristályrácsa a két résznyalábhoz viszonyítva ugyanolyan helyzetet foglaljon el, mint az osztó a két belőle kilépő nyalábhoz képest. Nem csupán arról van szó, hogy az *irányoknak* meg kell egyezniük: a rácspontoknak *illeszkedniük kell a hullámprofilhoz*, szinkronizáltan kell maximumba és minimumba kerülniük. Ha figyelembe vesszük, hogy hullámnak az osztó és az analizátor közti szakaszán mintegy 10^9 hullámhossz fér el (vagyis a fázis nagysága az analizátoron $\approx 2\pi \cdot 10^9$ -el egyenlő), megérthetjük, hogy a szükséges geometriai pontosságot csak egykristállyal lehet

megvalósítani. A kristálynövesztésen kívül a kísérlet nehéz pontja a fűlek kivágása (itt μm nagyságrendű pontosság szükséges), valamint a hőmérsékleti deformációk és a kristály saját súlyából eredő deformációk kiküszöbölése illetve kompenzálása.

72.Feladat: Tegyük fel, hogy az 1.résznyaláb fázisát megnöveljük egy önkényesen választott δ értékkel. Határozzuk meg a δ függvényében annak W_d , W_s valószínűségét, hogy azok a neutronok, amelyek a tükörnél az interferométerben maradnak, a direkt ill. a szórt irányban észlelhetők.

Megoldás: Az analizátorig az 1.nyaláb kétszer, a 2.-s egyszer változtat irányt, ezért az önkényes fázist is figyelembe véve az 1.nyaláb fázisa $(-\pi/2 + \delta)$ -val nagyobb a 2.-énél.

Az analizátoron áthaladva létrejöhet még egy $-\pi/2$ fáziskülönbség közöttük.

A direkt kimenő irányban a 2.nyaláb kapja ezt az extra fázist, ezért ebben az irányban a hullámfüggvény az

$$e^{i(-\pi/2 + \delta)} + e^{-i\pi/2} = (-i) (1 + e^{i\delta})$$

összeggel, a W_d találati valószínűség pedig az

$$\left| 1 + e^{i\delta} \right|^2 = 2(1 + \cos \delta)$$

kifejezéssel arányos. Mivel $\delta = 0$ -nál $W_d = 1$, ezért

$$W_d = \frac{1 + \cos \delta}{2}$$

ahonnan

$$W_s = \frac{1 - \cos \delta}{2}.$$

Következtetés: mialatt a δ fázis 2π -t változik, a találati valószínűség fokozatosan áttevéődik az egyik kimeneti irányról a másikra és vissza. ♣

Megjegyzés: A feladatban feltételezett fázisváltoztatást egy vékony alumíniumlap segítségével lehet a gyakorlatban megvalósítani. A diffrakcióelméletben megmutatják, hogy amorf közegben az atommagok hatása a nagy hullámhosszú neutronokra kiátlagolóódik és egy konstans U u.n. *optikai potenciállal* írható le. Az alumíniumlap ezért potenciálgátnak tekinthető (36.fejezet), és a hatását a potenciálgát T transzmissziós koefficiensével ((84) képlet) történő szorzással vehetjük figyelembe.

A diffrakcióelméletből az is kiderül, hogy $|r_k| \ll 1$, ezért a (84) alapján $T = e^{i\delta}$, ahol $\delta = (k_1 - k)a$ (a jelöléseket lásd a 36.fejezetben). Ha az alumíniumlapot a nyaláb kívüli tengely körül forgatjuk, a nyaláb menti vastagsága (az a értéke) változik. Ily módon tetszőlegesen változtathatjuk bármely résznyaláb fázisát. Ezt a lehetőséget a legtöbb kísérletben hasznosítják is.

3.47. A Born hipotézis pontos értelme

A Born hipotézis szolgáltatja a kvantummechanika matematikai apparátusának fizikai interpretációját. Speciálisan a helymérés példáján a hipotézis állítása az, hogy ha a rendszer hullámfüggvénye $\psi(x, y, z, t)$, akkor a t pillanatban végzett helymérésnél a részecskéket $|\psi(x, y, z, t)|^2 \cdot d\Omega$ valószínűséggel találjuk az x, y, z koordinátájú pont körüli $d\Omega$ térfogatban.

Kérdezzük meg például, milyen W_1, W_2 valószínűséggel észleljük az interferométeren keresztül átrepülő (egyetlen) neutront az 1. vagy a 2. belső résznyalámban.

Ha a t olyan, hogy a neutron mozgását leíró hullámcsomag az interferométeren belül nulla, akkor természetesen nulla valószínűséggel. De vegyünk olyan t -t, amikor a hullámcsomag teljes egészében az interferométeren belül helyezkedik el. Mivel a fűlek — feltevés szerint — pontosan felezik a nyalábokat, nyilván

$$W_1 = \int_1 d\Omega \cdot |\psi(x, y, z, t)|^2 = \frac{1}{2}$$

$$W_2 = \int_2 d\Omega \cdot |\psi(x, y, z, t)|^2 = \frac{1}{2}$$

(az integrálások az 1. illetve a 2. résznyaláb térfogatára terjednek ki).

Hogyan ellenőrizhetjük ezt az eredményt? Úgy, hogy egy-egy neutrontektort helyezünk el a résznyalábok útjába. Minden egyes neutron csak az egyik detektort szolgáltatta meg (mert mint egész részecske csak az egyikben tudja létrehozni az érkezését jelző magreakciót), de sok neutron észlelésénél a detektorok egyenlő számú neutront fognak jelezni. Pontosabban, ha N_1 és N_2 a megfelelő nyalábokban észlelt neutronok száma, akkor $N = N_1 + N_2 \rightarrow \infty$ -nél $\frac{N_1}{N}, \frac{N_2}{N} \rightarrow \frac{1}{2}$.

Amikor az interferométer a rendeltetésének megfelelően üzemel, a belső résznyalábok útjában természetesen nincsenek detektorok; a neutronokat a kimeneti s és d irányban regisztráljuk. Feltehetünk azonban egy kérdést, amely ennek a fejezetnek az alapproblémáját fogalmazza meg: Mondhatjuk-e, hogy azokban a pillanatokban, amikor a hullámcsomagok az interferométeren belül vannak, a neutronok *most is 1/2 valószínűséggel tartózkodnak az egyik vagy a másik résznyalámban?*

Amikor az interferométeren belül detektáltuk őket, valóban ez volt a helyzet. De történhetett-e változás csupán attól, hogy a detektorokat áthelyeztük az interferométeren kívülre?

Az ember hajlamos erre a kérdésre határozott nemi válaszolni és ezzel arra szabni, hogy a neutronok továbbra is 1/2 valószínűséggel tartózkodnak vagy az 1., vagy a 2. résznyalámban. A neutronokat ugyanis mindig egész részecskének tapasztaljuk és annak, hogy melyik résznyalábba kerülnek, az osztóból való kilépésnél el kell dőlnie. Az osztóból történő kilépés módja pedig nem változhat meg attól, hogy vannak-e detektorok valahol (elvben tetszőlegesen távol) a tükör és az analízátor között.

Ezt az érvelést azonban a leghatározottabban cáfolja a résznyalábok interferenciája. Mint láttuk, az interferencia triád a legbiztosabb jele annak, hogy az a valami,

ami az interferométeren átjön (és a kimeneten részecskeként észleljük), az interferométeren belül nem viselkedhet részecskeként. Ha ugyanis *vagy* az egyik úton, *vagy* a másikon érkezne az analizátorra, nem tapasztalhatnánk interferenciát.

Az osztóról való kilépéskor tehát csak abban az esetben dől el, hogy melyik résznyalábba kerül a neutron, amikor erről közvetlenül, a belső nyalábok útjában elhelyezett detektorok segítségével meg is tudunk győződni. Az eredeti kérdésünkre a korrekt válasz tehát az, hogy amikor nem figyeljük meg közvetlenül, akkor *nem igaz az*, hogy a neutron $1/2$ valószínűséggel *van* az egyik vagy a másik résznyalábban. Nem azért nem igaz, mert a valószínűség értéke más, hanem azért, mert a kérdés alapjául szolgáló kép hibás: a berendezésen áthaladó neutron, amikor nem észleljük, nem választ a nyalábok között: az, hogy az egyikben van, úgy látszik nem zárja ki, hogy ugyanakkor a másikban is lehessen.

Ezt a következtetést úgy is kifejezhetjük, hogy *a klasszikus fizika szerint egymást kizáró lehetőségek a mikrofizikában nem zárják ki feltétlenül egymást* (hanem „interferálnak”). Valószínűleg ez az állítás foglalja össze a legtömörebben a klasszikus és a kvantumfizika közötti alapvető különbséget.

Vegyük észre, hogy az ellentmondás, amit ez a paradoxon tükröz, nem tényszerű (logikai) ellentmondás, hanem (csak?) annak a szemléleti keretnek az elégtelenségére világít rá, amelybe a jelenségeket (adott esetben a testek helyváltoztatását) belefoglaljuk. Fogalmazzuk meg újra a két látszólag egymásnak ellentmondó állítást:

1) Amikor a detektorok a résznyalábokban vannak, minden neutron vagy az egyik, vagy a másik résznyalábban regisztrálják.

2) Amikor a detektorok az interferométeren kívül vannak, a kísérleti eredményekkel nem fér össze, hogy úgy *képzelnék*, hogy a neutronok most is mindig vagy az egyik vagy a másik résznyalábban haladnak át az interferométeren.

Figyeljük meg, hogy *nem ugyanarról* mondjuk azt, hogy igen is meg nem is, hiszen a két esetben a fizikai szituáció különbözik egymástól. Azért érezzük mégis, hogy a két állítás együtt paradoxális, mert a tapasztalataink (vagy velünk született felfogás-módunk) alapján úgy *képzelnék*, hogy a nyalábválasztásnak már az osztóból történő kilépésnél el kellett dőlnie, és nem függhet attól, hogy a további útja során mi vár még a neutronra.

Ez azonban csak várákozás, ösztönös hipotézis, és semmiképpen sem tekinthető *ténynek*. Hiszen nyilvánvalóan nem értelmes az a kérdés, hogy milyen valószínűséggel észlelik a neutronokat a belső nyalábokban elhelyezett detektorok, amikor nincsenek a belső nyalábokban. Ez a kérdés értelmesen csak feltételes módban fogalmazható meg (milyen valószínűséggel észlelnék...). A mindennapi életben — és a nemkvantum fizikában is — számtalanszor adunk teljesen jóhiszemű választ az ilyen kérdésekre, nem gondolva rá, hogy a válasz *elvileg bizonyíthatatlan hipotézisen alapul*: azon, hogy a feltétel megváltozása a válasz érvényessége szempontjából lényegtelen. Miért is lenne lényeges az osztóból való kilépés szempontjából, hogy a távoli detektor az analizátor előtt vagy mögött van? — gondoljuk magunkban ösztönösen. Ha makroszkópikus golyókról lenne szó, nem is volna lényeges: ezt onnan tudhatjuk, hogy a hétköznapi

döntéseink és a makroszkópikus világgal foglalkozó tudományos gyakorlat is sikeres, pedig ezen a feltevésen alapul. De amikor neutronokat vizsgálunk, a változás lényeges — ezt bizonyítja az interferencia.

Összefoglalva megállapíthatjuk, hogy a Born hipotézis csak a *tényleges megfigyelések* eredményének a valószínűségét adja meg. Nem alkalmazhatjuk olyankor, amikor a mérést csak elgondoljuk. Nem azt mondja meg, hogy a részecske milyen valószínűséggel *van* itt vagy ott, hanem azt, hogy ha alkalmas mérőeszközzel megfigyeljük, milyen valószínűséggel *találjuk* meg itt vagy ott.

Áttérünk az impulzusmomentum kvantummechanikai tárgyalására. A kvantummechanikában az impulzusmomentum ugyanazért fontos, mint a klasszikusban: a centrálszimmetrikus problémákban mozgásállandó.

3.48. Az impulzusmomentum operátora

Az impulzusmomentum operátora az

$$\vec{\hat{L}} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z) = (\vec{\hat{r}} \times \vec{\hat{p}})$$

vektoroperátor, amelynek komponensei a következők:

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \quad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x.$$

A tényezők sorrendje a szorzatokban tetszőleges, mert csak kommutáló operátorok fordulnak elő bennük.

73.Feladat: Igazoljuk, hogy

$$\left. \begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= i\hbar\hat{L}_z \\ [\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= i\hbar\hat{L}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= i\hbar\hat{L}_y \end{aligned} \right\} \quad (101)$$

Igazolás:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x] - [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z].$$

A tagok számításánál a kanonikus felcserélési relációkat használjuk.

$$[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] = \hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_x - \hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z = \hat{y}(\hat{z}\hat{p}_z - i\hbar)\hat{p}_x - \hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z = -i\hbar\hat{y}\hat{p}_x.$$

Hasonlóan látható be, hogy

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

Így

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = i\hbar L_z. \clubsuit$$

74.Feladat: Igazoljuk, hogy

$$[\hat{L}_x, \hat{L}^2] = [\hat{L}_y, \hat{L}^2] = [\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0. \quad (102)$$

Igazolás:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}^2] = [\hat{L}_x, \hat{L}_x^2] + [\hat{L}_x, \hat{L}_y^2] + [\hat{L}_x, \hat{L}_z^2].$$

A kommutátorok kiszámítására az u.n. „deriválási szabályt” használjuk, amely három tetszőleges \hat{A} , \hat{B} , \hat{C} operátorra érvényes és a kommutátorok kiírásával igazolható:

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}].$$

Eszerint

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_x^2] &= 0 \\ [\hat{L}_x, \hat{L}_y^2] &= [\hat{L}_x, \hat{L}_y] \hat{L}_y + \hat{L}_y [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar (\hat{L}_z \hat{L}_y + \hat{L}_y \hat{L}_z) \\ [\hat{L}_x, \hat{L}_z^2] &= [\hat{L}_x, \hat{L}_z] \hat{L}_z + \hat{L}_z [\hat{L}_x, \hat{L}_z] = -i\hbar (\hat{L}_y \hat{L}_z + \hat{L}_z \hat{L}_y) \end{aligned}$$

ahonnan következik az állítás. \clubsuit

75.Feladat: Igazoljuk, hogy

$$[\hat{L}_x, \hat{y}] = i\hbar\hat{z} \quad \text{stb.}$$

$$[\hat{L}_x, \hat{p}_y] = i\hbar\hat{p}_z \quad \text{stb.} \clubsuit$$

76.Feladat: Igazoljuk, hogy ha $\hat{r}^2 = \hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2$, valamint $\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2$, akkor

$$[\hat{L}_x, \hat{r}^2] = 0 \quad \text{stb.} \quad [\hat{L}_x, \hat{p}^2] = 0 \quad \text{stb.} \clubsuit$$

Következmény: ha f az origótól mért távolságtól és/vagy az impulzus abszolút értékétől függ és az origó körül hatványsorba fejthető függvény, akkor

$$[\hat{L}_x, f(\hat{r})] = [\hat{L}_x, f(\hat{p})] = 0 \quad \text{stb.}$$

77.Feladat: Legyen \hat{H} centrális erőterben mozgó tömegpont Hamilton-operátora. Mutassuk meg, hogy

$$[\hat{L}_x, \hat{H}] = [\hat{L}_y, \hat{H}] = [\hat{L}_z, \hat{H}] = [\hat{L}^2, \hat{H}] = 0. \clubsuit \quad (103)$$

3.49. Az \hat{L}^2 operátor sajátértékei és sajátfüggvényei

A klasszikus mechanikában az $\vec{L} = (\vec{r} \times \vec{p})$ impulzusmomentum nem függ a \vec{p} radiális irányú komponensétől. A kvantummechanikában ennek az felel meg, hogy az \vec{L} operátor nem tartalmaz r -szerinti deriválást. A bizonyítás érdekében vegyünk egy tetszőleges ψ -t, amiben — ha szükséges —, a Descartes-koordinátákat kifejezhetjük gömbi koordinátákon keresztül. Hassunk erre az impulzusmomentum operátorával, amelyben \vec{r} a koordinátával való szorzás operátora, \vec{p} pedig a gradiens \hbar/i -szerese:

$$(\vec{r} \times \vec{p})\psi = \frac{\hbar}{i}(r\vec{e}_r \times \vec{\nabla}\psi).$$

Ebben a képletben \vec{e}_r a gömbi koordinátarendszer lokális bázisának radiális egységvektora. Célszerű a gradiens gömbi koordinátákban felírt alakját használni (Mechanika jegyzet 6.fejezet). Akkor

$$\vec{\nabla}\psi = \frac{\partial\psi}{\partial r}\vec{e}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\vec{e}_\vartheta + \frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\vec{e}_\varphi.$$

Ha ezt a vektoriális szorzatba behelyettesítjük, az $(\vec{e}_r \times \vec{e}_r) = 0$ következtében a ψ r -szerinti deriválása valóban kiesik a képletből.

Eredményünkből az is következik, hogy az \hat{L}^2 operátor is csak ϑ és φ szerinti deriválást tartalmaz. Az operátor konkrét alakját a legegyszerűbben így találhatjuk meg:

A kinetikus energia a

$$K = K_r + \frac{L^2}{2mr^2}$$

alakban is felírható. Ez a képlet a klasszikus- és a kvantummechanikában egyaránt érvényes. Az Elektrodinamika jegyzet 5.fejezetében a ∇^2 -re felírt képlet felhasználásával

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\cdot\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\cdot\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right].$$

Nyilvánvaló, hogy az első két tag felel meg \hat{K}_r -nek (a radiális kinetikus energiában csak r -szerinti derivált szerepelhet, az \hat{L}^2 -ben nem szerepelhet r -szerinti derivált), ezért

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} + \frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right].$$

Hasznos lesz ezt az operátort ∇^2 -n keresztül is kifejezni:

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 &= 2mr^2(\hat{K} - \hat{K}_r) = -\hbar^2 r^2 \nabla^2 + \hbar^2 \left[r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial}{\partial r} \right] = \\ &= -\hbar^2 \left[r^2 \nabla^2 - 2r \frac{\partial}{\partial r} - r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right].\end{aligned}\tag{104}$$

Az \hat{L}^2 sajátfüggvényei szoros kapcsolatban vannak az x, y, z változók l -d fokú homogén polinómjaival³⁹, amelyeket most Z_l -vel fogunk jelölni. Például

$$\left. \begin{aligned}Z_0 &= a \\ Z_1 &= ax + by + cz \\ Z_2 &= ax^2 + by^2 + cz^2 + dxy + exz + fyz \\ Z_3 &= ax^3 + by^3 + cz^3 + dx^2y + \dots + jxyz\end{aligned} \right\}\tag{105}$$

(a képletekben a, b, c, \dots, j tetszőleges numerikus koefficiensek).

Ha áttérünk polárkoordinátákra, akkor az r kiemelhető r^l formájában:

$$Z_l(x, y, z) = r^l \cdot Y_l(\vartheta, \varphi).$$

Ennek alapján

$$\frac{\partial Z_l}{\partial r} = \frac{l}{r} Z_l, \quad \frac{\partial^2 Z_l}{\partial r^2} = \frac{l(l-1)}{r^2} Z_l.$$

Így, a (104) alapján

$$\hat{L}^2 Z_l = -\hbar^2 \left[r^2 \nabla^2 Z_l - l(l+1) Z_l \right].$$

Innen már könnyű észrevenni, hogy azok a Z_l -k lesznek \hat{L}^2 sajátfüggvényei, amelyek kielégítik a

$$\nabla^2 Z_l = 0\tag{106}$$

Laplace-egyenletet (Elektrodinamika jegyzet 6.fejezet), ugyanis az ilyen Z_l -kre

$$\hat{L}^2 Z_l = \hbar^2 \cdot l(l+1) Z_l.$$

A Laplace-egyenletet kielégítő Z_l -ket l -d fokú *harmonikus polinómnak* nevezzük. Az \hat{L}^2 operátor sajátfüggvényei ezek a polinómnak, a hozzájuk tartozó sajátérték pedig $\hbar^2 \cdot l(l+1)$ -el egyenlő.

Az impulzusmomentum nagysága tehát a $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ értékeket veheti fel ($l = 0, 1, 2, \dots$). Emléztetünk rá, hogy a Bohr-Sommerfeld modellben (10.fejezet) ugyanezre a mennyiségre a $\hbar l$ értékeket kaptuk, amelyek csak $l \gg 1$ -nél egyeznek a kvantummechanika eredményével. Általában is igaz, hogy nagy kvantumszámoknál a

³⁹Ld. az Elektrodinamika jegyzet 43.fejezetét.

Bohr-Sommerfeld modell a kvantummechanika egyre jobb közelítése (de számos eredménye a kvantumszámok kis értékeinél is érvényes).

Kérdés: hányszorosan elfajult a $\hbar^2 \cdot l(l+1)$ sajátérték? Nyilván annyiszor, ahány olyan független Z_l van, amely kielégíti a Laplace-egyenletet.

Adott l -nél annyi független Z_l van, ahány tagú Z_l általános kifejezése⁴⁰. Jelöljük ezt a számot F_l -el. A (105) mutatja, hogy $F_0 = 1$, $F_1 = 3$, $F_2 = 6$, $F_3 = 10$. Általában F_l az a szám, ahányféleképpen l egyforma golyót el lehet osztani három urnában (amelyeket x -el, y -al, z -vel jelölhetünk). Másképpen: ahányféleképpen két egyforma „falat” el lehet helyezni $l+2$ helyen (a maradék l helyen vannak a golyók). Az eredmény:

$$F_l = \binom{l+2}{2} = \frac{(l+2)(l+1)}{2}.$$

Amikor Z_l általános kifejezését behelyettesítjük a Laplace-egyenletbe, a baloldalon olyan Z_{l-2} polinómot kapunk, amelynek F_{l-2} darab koefficiense a kiindulásul vett Z_l koefficienseinek meghatározott függvénye. Ahhoz, hogy Z_l kielégítse a Laplace-egyenletet, ennek az F_{l-2} koefficiensnek nullával kell egyenlőnek lennie, ami F_{l-2} darab feltétel a Z_l polinóm F_l koefficiensére. Ebből következik, hogy a lineárisan független l -d fokú harmonikus polinómok száma

$$\nu_l = F_l - F_{l-2} = 2l + 1.$$

Ennyiszor elfajult az l kvantumszámú sajátérték. A Bohr-Sommerfeld modellben ugyanezt az elfajulást találtuk.

3.50. Az \hat{L}^2 és az \hat{L}_z közös sajátfüggvényei

A (102) mutatja, hogy \hat{L}^2 kommutál az impulzusmomentum operátor mindegyik komponensével, ezért bármelyikkel van közös sajátfüggvényrendszere. A komponensek azonban egymással nem kommutálnak (ld. (101)-t) és nincs közös sajátfüggvényrendszerük. Ezért meg kell elégednünk azzal, hogy az \hat{L}^2 elfajult sajátfüggvényeit úgy lineárkombináljuk, hogy valamelyik impulzusmomentum komponensnek is a sajátfüggvényei legyenek. A kialakult tradíciónak megfelelően a z -komponenst választjuk: ez a választás símul a legtermészetesebben a polárkoordináták definíciójához.

A feladat tehát a következő: keressük meg az l -d fokú harmonikus polinómnak azokat a lineárkombinációit, amelyek az \hat{L}_z sajátfüggvényei. A feladat polárkoordinátákban oldható meg a legkönnyebben, amelyben az \hat{L}_z az egyszerű

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

alakú.

78.Feladat: Mutassuk meg, hogy ez az operátor azonos $\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$ -el.

⁴⁰A független Z_l -k pl az x , az y , valamint a z egytagú elsőfokú homogén "polinómnak".

Igazolás: Amikor egy x, y, z függvényt φ szerint deriválunk, a

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{\partial x}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial z}$$

képletet használjuk. Mivel

$$x = r \sin \vartheta \cdot \cos \varphi \quad y = r \sin \vartheta \cdot \sin \varphi \quad z = r \cos \vartheta, \quad (107)$$

ezért

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial \varphi} &= -r \sin \vartheta \cdot \sin \varphi = -y \\ \frac{\partial y}{\partial \varphi} &= r \sin \vartheta \cdot \cos \varphi = x \\ \frac{\partial z}{\partial \varphi} &= 0. \end{aligned}$$

Így

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} = x \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - y \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x},$$

ami az $\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$ operátor koordinátareprezentációjában felírva. ♣

Jelöljük az \hat{L}_z sajátértékeit $\hbar m$ -el, ahol m egyelőre ismeretlen dimenziótlan szám (az impulzusmomentum és a Planck-állandó dimenziója ugyanaz), a $\hbar m$ -hez tartozó sajátfüggvényt pedig $\chi_m(\varphi)$ -vel. A sajátértékegyenlet:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \chi_m}{\partial \varphi} = \hbar m \cdot \chi_m,$$

amelynek megoldása

$$\chi_m = konstans \cdot e^{im\varphi} \quad (0 \leq \varphi < 2\pi). \quad (108)$$

A *konstans* itt úgy értendő, hogy nem függ φ -től, a többi változót azonban természetesen tartalmazhatja.

A $\chi_m(\varphi)$ sajátfüggvény φ -beli folytonossága megköveteli, hogy $\chi_m(0)$ legyen egyenlő $\chi_m(2\pi)$ -vel, azaz legyen

$$e^{im \cdot 2\pi} = 1.$$

Ez azonban csak akkor teljesül, ha az m kvantumszám egész.

Az impulzusmomentum z -vetülete tehát a \hbar egész számú többszöröse (a Bohr-Sommerfeld modellben ugyanez volt a helyzet). Mivel a z -tengely tetszőleges helyzetű, az impulzusmomentum bármely irányra vetett vetülete a Planck-állandó egész számú többszöröse.

Az \hat{L}_z sajátfüggvényeinek az ismeretében a fejezet elején megfogalmazott feladatot pontosíthatjuk: keressük meg az l -d fokú harmónikus polinómoknak azokat a Z_{lm} lineárkombinációit, amelyek a φ azimutiszöveget $e^{im\varphi}$ szorzófaktor formájában tartalmazzák.

A megoldást az $l = 1$ polinómokon mutatjuk be. A független Z_1 -ket úgy kaphatjuk, hogy (105) második sorában először csak az a -t, majd csak a b -t végül csak a c -t tekintjük nullától különbözőnek és a határozottság kedvéért 1-nek választjuk őket. Így kapunk $F_1 = 3$ független első fokú polinómot, amelyek a következők:

$$f_a(x, y, z) = x, \quad f_b(x, y, z) = y, \quad f_c(x, y, z) = z.$$

Ezek egyben harmónikus polinómok is (a második deriváltjaik nullák). A φ függésüket (107) mutatja. Látjuk, hogy csak $f_c = z$ az, amelyik az azimutiszöveget $e^{im\varphi}$ alakban tartalmazza ($m = 0$ -val). A másik kettőt még alkalmas módon lineárkombinálni kell:

$$\begin{aligned} f_a(x, y, z) - if_b(x, y, z) &= x - iy = r \sin \vartheta \cdot e^{-i\varphi} & (m = -1) \\ f_a(x, y, z) + if_b(x, y, z) &= x + iy = r \sin \vartheta \cdot e^{i\varphi} & (m = +1). \end{aligned}$$

Az \hat{L}^2 sajátértékét meghatározó $l = 1$ mellékkvantumszámhoz tehát az \hat{L}_z sajátértékét meghatározó mágneses kvantumszám $-1, 0, +1$ értéke tartozik (v.ö. a 11.fejezettel). A közös sajátfüggvényeket is megtaláltuk, csak még normálni kell őket.

Polárkoordinátákban a

$$(\vec{\psi}, \vec{\phi}) = \int d\Omega \cdot \psi^*(r, \vartheta, \varphi) \phi(r, \vartheta, \varphi)$$

skalárszorzatban $d\Omega = r^2 \sin \vartheta \cdot dr \cdot d\vartheta \cdot d\varphi$, és az integrálás a $0 \leq r < \infty$, $0 \leq \vartheta \leq \pi$, $0 \leq \varphi < 2\pi$ tartományra terjed ki. Amikor azonban az impulzusmomentumról tárgyalunk, a hullámfüggvényeknek csak a ϑ , φ függését vizsgáljuk, a radiális irányú mozgást figyelmen kívül hagyjuk. Célszerű ezért az impulzusmomentum sajátfüggvényeket az *egységgömbre* ($r = 1$) korlátozott Z_{lm} -knek tekinteni:

$$\begin{aligned} Z_{lm}(x, y, z) &= r^l \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \\ Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= Z_{lm}(x, y, z)|_{x^2+y^2+z^2=1}. \end{aligned}$$

Az egységgömbön értelmezett Y_{lm} függvényeket, amelyek \hat{L}^2 és \hat{L}_z közös sajátfüggvényei, *gömbfüggvényeknek* nevezzük. Amikor gömbfüggvények skalárszorzatait számoljuk, az r -t 1-nek kell tekinteni és az r -szerinti integrálást el kell hagyni, vagyis az integrálást az egységgömb felületére kell korlátozni.

Fejezzük most be az $l = 1$ eset tárgyalását az 1-re normált Y_{1m} gömbfüggvények megkeresésével. Nyilván

$$\begin{aligned}
Y_{1-1}(\vartheta, \varphi) &= N_{-1} \cdot \sin \vartheta \cdot e^{-i\varphi} \\
Y_{10}(\vartheta, \varphi) &= N_0 \cdot \cos \vartheta \\
Y_{11}(\vartheta, \varphi) &= N_1 \cdot \sin \vartheta \cdot e^{i\varphi}.
\end{aligned}$$

79. Feladat: Határozzuk meg a (valós) normálási tényezőket ezekben a képletekben.

Megoldás:

$$\begin{aligned}
&\int Y_{1-1}^* Y_{1-1} \sin \vartheta \cdot d\vartheta \cdot d\varphi N_{-1}^2 \cdot 2\pi \int_0^\pi \sin^3 \vartheta \cdot d\vartheta = \\
&= N_{-1}^2 \cdot 2\pi \int_\pi^0 (1 - \cos^2 \vartheta) d \cos \vartheta = N_{-1}^2 \cdot 2\pi \int_{-1}^1 (1 - u^2) du = N_{-1}^2 \cdot \frac{8\pi}{3}.
\end{aligned}$$

Ahhoz, hogy ez 1-el legyen egyenlő, a normálási tényezőt

$$N_{-1} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}}$$

valamelyikének kell választani. Az alkalmazások szempontjából célszerű előjelkonven-
ciót nem részletezzük, csak annyit jegyzünk meg, hogy mindig teljesül az

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

reláció. A normálási tényezők (a standard előjelekkel) a következők:

$$\begin{aligned}
N_{\pm 1} &= \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \\
N_0 &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}}. \clubsuit
\end{aligned}$$

Térjünk most át az általános eset áttekintésére. Az l -d fokú polinómból csak olyan $e^{im\varphi}$ -vel arányos kombinációk képezhetők, amelyekben

$$-l \leq m \leq l.$$

Az m legnagyobb lehetséges értékéhez tartozó polinóm ugyanis az

$$(x + iy)^l = r^l \sin^l \vartheta \cdot e^{il\varphi}$$

kombináció, amelyben egyáltalán nincs z -változó (a z független φ -től). Ez a kombináció harmónikus, mert tetszőleges l -nél eleget tesz a Laplace-egyenletnek:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x+iy)^l &= l(l-1)(x+iy)^{l-2} \\ \frac{\partial^2}{\partial y^2}(x+iy)^l &= i^2 \cdot l(l-1)(x+iy)^{l-2} \\ \frac{\partial^2}{\partial z^2}(x+iy)^l &= 0, \\ \nabla^2(x+iy)^l &= 0.\end{aligned}$$

A legkisebb, $m = -l$ -hez tartozó kombináció pedig az $(x-iy)^l$, ami szintén harmónikus. Így általában

$$Y_{l\pm l} = N_{\pm l} \sin^l \vartheta \cdot e^{\pm il\varphi}.$$

80.Feladat: Igazoljuk, hogy $z(x+iy)^{l-1} \sim Y_{l(l-1)}$. ♣

Két olyan gömbfüggvénynek, amelyek a mágneses kvantumszámban különböznek, ortogonálisnak kell lennie egymásra, mert az \hat{L}_z operátor különböző sajátértékéhez tartozó sajátfüggvények (20.fejezet 3.tulajdonság).

81.Feladat: Igazoljuk ezt az állítást direkt számítással.

Igazolás: A két gömbfüggvény az azimutszöget az $e^{im\varphi}$, illetve az $e^{im'\varphi}$ szorzófaktorban tartalmazza, ezért skalárszorzatukban a φ -integrál a következő:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \cdot e^{i(m-m')\varphi} = \begin{cases} \frac{1}{i(m-m')} e^{i(m-m')\varphi} \Big|_0^{2\pi} = 0 & \text{ha } m \neq m' \\ \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi & \text{ha } m = m'. \quad \clubsuit \end{cases}$$

Hasonlóan, két olyan gömbfüggvénynek, amelyek az l mellékkvantumszámban különböznek, ortogonálisnak kell lennie egymásra, mert az \hat{L}^2 operátor különböző sajátértékéhez tartozó sajátfüggvények.

82.Feladat: Mutassuk meg, hogy $Y_{(l+1)l}$ és Y_{ll} ortogonális egymásra (noha mágneses kvantumszámaik azonosak).

Igazolás: A 80.feladat mintájára $Y_{(l+1)l} \sim z(x+iy)^l$. Láttuk továbbá, hogy $Y_{ll} \sim (x+iy)^l$. Így

$$Y_{(l+1)l}^* \cdot Y_{ll} \sim z(x-iy)^l (x+iy)^l = z(x^2+y^2)^l = z(1-z^2)^l.$$

Ez a függvény csak előjelben különbözik az egységgömb $z > 0$ és $z < 0$ féltékéjén, ezért az egységgömbre vett integrálja zérus. ♣.

Foglaljuk össze a megállapításainkat.

Az \hat{L}^2 és a \hat{L}_z operátorok közös sajátfüggvényei az $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ gömbfüggvények.

A sajátértékegyenletek a következők:

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 Y_{lm} &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm} \quad (l = 0, 1, 2, \dots) \\ \hat{L}_z Y_{lm} &= \hbar m Y_{lm} \quad (-l \leq m \leq l).\end{aligned}$$

A sajátértékek leolvashatók ezekből az egyenletekből.

Azok a gömbfüggvények, amelyek legalább az egyik indexükben különböznek, ortogonálisak egymásra (mert legalább az egyik operátor különböző sajátértékeihez tartoznak), az azonos indexűek pedig normáltak:

$$\int Y_{l'm'}^* Y_{lm} \sin \vartheta \cdot d\vartheta \cdot d\varphi = \delta_{l'l} \cdot \delta_{m'm}.$$

Az $l = 0, 1, 2$ indexű gömbfüggvények a következők:

$$\begin{aligned}Y_{00} &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \\ Y_{1+1} &= -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \vartheta \cdot e^{i\varphi} \\ Y_{10} &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \vartheta \\ Y_{1-1} &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \vartheta \cdot e^{-i\varphi} \\ Y_{2+2} &= \frac{1}{4}\sqrt{\frac{3 \cdot 5}{2\pi}} \sin^2 \vartheta \cdot e^{2i\varphi} \\ Y_{2+1} &= -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3 \cdot 5}{2\pi}} \cos \vartheta \cdot \sin \vartheta \cdot e^{i\varphi} \\ Y_{20} &= \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1) \\ Y_{2-1} &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3 \cdot 5}{2\pi}} \cos \vartheta \cdot \sin \vartheta \cdot e^{-i\varphi}\end{aligned}$$

$$Y_{2+2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{3 \cdot 5}{2\pi}} \sin^2 \vartheta \cdot e^{-2i\varphi}.$$

Mint látjuk, ezek mind (108) alakúak.

83.Feladat: Az R sugarú gömbön szabadon mozog egy tömegpont. Határozzuk meg az energiaspektrumát és az energiasajátfüggvényeket.

Megoldás: Ezt a feladatot a Bohr-Sommerfeld modellben is tárgyaltuk (3.10 fejezet). A kinetikus energia klasszikus kifejezése alapján a Hamilton operátor konstans faktortól eltekintve azonos az impulzusmomentum négyzetének az operátorával:

$$\hat{H} = \hat{K} = \frac{1}{2mR^2} \hat{L}^2.$$

A sajátfüggvényei ezért a gömbfüggvények, a sajátértékei pedig

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mR^2} \quad (n = 0, 1, 2, \dots).$$

Az E_l sajátenergia $\nu_l = (2l+1)$ -szer elfajult a mágneses kvantumszám szerint ($-l \leq m \leq l$).

A Bohr-Sommerfeld modellben $E_l = \frac{\hbar^2 l^2}{2mR^2}$ -t kaptunk, ami csak $l \gg 1$ -nél korrekt. A harmónikus oszcillátor és a dobozba zárt tömegpont energiaspektruma alapján kissé meglepő, hogy nem kaptunk zéruspont energiát ($E_0 = 0$). Ez azonban nem mond ellent a bizonytalansági relációnak, mert az csak Descartes-koordinátákra és a hozzájuk tartozó impulzusokra érvényes.

Annak valószínűsége, hogy adott l, m kvantumszámú állapotban a tömegpontot a gömbfelület ϑ_P, φ_P koordinátájú P pontjának dA környezetében találjuk, $|Y(\vartheta_P, \varphi_P)|^2 \cdot dA$ -val egyenlő ($dA = \sin \vartheta \cdot d\vartheta d\varphi$ a felületelem). Alapállapotban ($l = m = 0$) például a találati valószínűség a gömb minden pontjában ugyanaz ($Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$). Az első gerjesztett állapotban ($l = 1$) a találati valószínűség $m = \pm 1$ -nél az „egyenlítőn” nagy (a „sarkokon” nulla), $m = 0$ -nál pedig a „sarkokon” nagy (az „egyenlítőn” nulla).♣

3.51. A gömbfüggvények transzformációja

Induljunk ki az egységgömbön mozgó tömegpont példájából. A választott \mathcal{K} koordináta rendszerben legyen a tömegpont az $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ hullámfüggvényű kvantumállapotban. Ez azt jelenti, hogy ha megmérjük az impulzusmomentum \vec{OZ} tengelyre vetett vetületét, 1 valószínűséggel a $\hbar m$ értéket kapjuk eredményül.

Térjünk át most egy másik \mathcal{K}' rendszerre, amely a \mathcal{K} elforgatottja a közös origó körül. Az impulzusmomentum vetülete az \vec{OZ}' -re is a \hbar egész számú többszöröse, amelyet $\hbar m'$ -vel jelölünk. Az impulzusmomentum hosszát az elforgatás nem változtatja, ezért $l' = l$ ⁴¹.

⁴¹Ennek matematikai okára később rámutatunk.

Kérdés: Ha az $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ állapotú részecske \vec{OZ}' tengelyre vetett impulzusmomentum vetületét mérjük, milyen valószínűséggel kapjuk eredményül a különböző lehetséges $\hbar m'$ értékeket?

Vegyünk először egy konkrét példát. Legyen a \mathcal{K} -beli hullámfüggvény $Y_{10}(\vartheta, \varphi)$, a \mathcal{K}' pedig legyen a \mathcal{K} elforgatottja a közös $O\bar{Y} = O\bar{Y}'$ tengely körül β szöggel. Ekkor

$$\begin{aligned}x &= \cos \beta \cdot x' + \sin \beta \cdot z' \\y &= y' \\z &= -\sin \beta \cdot x' + \cos \beta \cdot z'.\end{aligned}$$

Ha az \vec{OZ}' vetületet megmértük és $\hbar m'$ -t találtuk, akkor a projekciós posztulátum szerint közvetlenül a mérés után az állapotfüggvény $Y_{1m'}(\vartheta', \varphi')$ -vel egyenlő. Ha az $Y_{10}(\vartheta, \varphi)$ -t az összes különböző m' -jú $Y_{1m'}(\vartheta', \varphi')$ -k lineárkombinációjaként írjuk fel, a $\hbar m'$ érték $W'_{m'}$ találati valószínűsége az $Y_{1m'}(\vartheta', \varphi')$ koefficiensének az abszolút érték négyzetével egyenlő.

A feladat tehát az, hogy $Y_{10}(\vartheta, \varphi)$ -t felírjuk $Y_{1-1}(\vartheta', \varphi')$, $Y_{10}(\vartheta', \varphi')$, valamint $Y_{1+1}(\vartheta', \varphi')$ lineárkombinációjaként.

$$Y_{10}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \vartheta = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} z = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} (-\sin \beta \cdot x' + \cos \beta \cdot z').$$

A kapcsolatot a vesszős Descartes- és polárkoordináták között is (107) adja meg (természetesen esetünkben $r' = r = 1$), ezért

$$\begin{aligned}z' &= \cos \vartheta' = 2 \sqrt{\frac{\pi}{3}} Y_{10}(\vartheta', \varphi') \\x' &= \sin \vartheta' \cos \varphi' = \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (Y_{1-1}(\vartheta', \varphi') - Y_{1+1}(\vartheta', \varphi')).\end{aligned}$$

A keresett lineárkombináció tehát a következő:

$$Y_{10}(\vartheta, \varphi) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \cdot Y_{1-1}(\vartheta', \varphi') + \cos \beta \cdot Y_{10}(\vartheta', \varphi') + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \cdot Y_{1+1}(\vartheta', \varphi'),$$

ahonnan

$$W'_0 = \cos^2 \beta \quad W'_1 = W'_{-1} = \frac{1}{2} \sin^2 \beta.$$

Ennek az — elvben egyszerű — eljárásnak az általános formáját részletesen kidolgozták. A \mathcal{K}' orientációját a \mathcal{K} -hoz képest az α , β , γ Euler-szögekkel⁴² adjuk meg.

⁴²Mechanika jegyzet 33.fejezet.

Induljunk ki abból, hogy \mathcal{K}' fedi a \mathcal{K} -t. Végezzük el a \mathcal{K}' rendszer következő három pozitív irányú forgatását:

1) α -szögű forgatás a közös $\vec{OZ} = \vec{OZ}'$ körül ($0 \leq \alpha < 2\pi$); 2) β szögű forgatás az \vec{OY}' új helyzete körül ($0 \leq \beta \leq \pi$); 3) γ szögű forgatás az \vec{OZ}' új helyzete körül ($0 \leq \gamma < 2\pi$).

Mint látjuk, az α és a β nem más, mint a \vec{OZ}' irány azimut- és polárszöge.

A \mathcal{K} -beli gömbfüggvények előállítását a \mathcal{K}' -beli gömbfüggvények lineárkombinációjaként (és viszont) a *Wigner-függvények* segítségével történik. Mindenekelőtt világos, hogy egy homogén polinóm fokszáma nem változhat meg attól, hogy forgatással új Descartes-koordinátákat vezetünk be. Ez a matematikai oka annak, hogy az impulzuszómomentum hossza (az l kvantumszám) nem változik meg a koordinátarendszer elforgatásakor. A gömbfüggvények maguk azonban megváltoznak, mindegyikük az adott l -hez tartozó összes gömbfüggvény lineárkombinációjává válik:

$$Y_{lm'}(\vartheta', \varphi') = \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \cdot D_{mm'}^l(\alpha, \beta, \gamma). \quad (109)$$

Abból, hogy a vesszőtlen és a vesszős argumentumú gömbfüggvények egyaránt ortonormáltak belátható, hogy a transzformáció inverze

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \sum_{m'=-l}^l D_{mm'}^{l*}(\alpha, \beta, \gamma) \cdot Y_{lm'}(\vartheta', \varphi'). \quad (110)$$

A $D_{mm'}^l(\alpha, \beta, \gamma)$ függvényeket nevezzük *Wigner-függvényeknek*. Általános alakjuk:

$$D_{mm'}^l(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-im\alpha} d_{mm'}^l(\beta) e^{-im'\gamma}; \quad (d_{mm'}^l \text{ em valós}). \quad (111)$$

Az $l = 1, 2$ indexszű $d_{mm'}^l$ függvényeket táblázatban adjuk meg. A D^1 függvények — mint példánkból látható, — a vektorok transzformációját határozzák meg, ha az x és az y komponensek helyett ezek $x \pm iy$ típusú komplex kombinációit (az $Y_{1\pm 1}$ függvényeket) használjuk. Ez az egyetlen Wigner-függvény, ami a szemlélet alapján felírható, ezért használtuk példaként éppen ezt.

A $d_{mm'}^1$ függvények.

	$m' = 1$	$m' = 0$	$m' = -1$
$m = 1$	$\frac{1+\cos \beta}{2}$	$-\frac{\sin \beta}{\sqrt{2}}$	$\frac{1-\cos \beta}{2}$
$m = 0$	$\frac{\sin \beta}{\sqrt{2}}$	$\cos \beta$	$-\frac{\sin \beta}{\sqrt{2}}$
$m = -1$	$\frac{1-\cos \beta}{2}$	$\frac{\sin \beta}{\sqrt{2}}$	$\frac{1+\cos \beta}{2}$

A $d_{mm'}^2$ függvények.

	$m' = 2$	$m' = 1$	$m' = 0$	$m' = -1$	$m' = -2$
$m = 2$	$\frac{(1+\cos \beta)^2}{4}$	$-\frac{\sin \beta(1+\cos \beta)}{2}$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}\sin^2 \beta$	$-\frac{\sin \beta(1-\cos \beta)}{2}$	$\frac{(1-\cos \beta)^2}{4}$
$m = 1$	$\frac{\sin \beta(1+\cos \beta)}{2}$	$\frac{2\cos^2 \beta+\cos \beta-1}{2}$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}\sin \beta \cos \beta$	$-\frac{2\cos^2 \beta-\cos \beta-1}{2}$	$-\frac{\sin \beta(1-\cos \beta)}{2}$
$m = 0$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}\sin^2 \beta$	$\sqrt{\frac{3}{2}}\sin \beta \cos \beta$	$\frac{3\cos^2 \beta-1}{2}$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}\sin \beta \cos \beta$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}\sin^2 \beta$
$m = -1$	$\frac{\sin \beta(1-\cos \beta)}{2}$	$-\frac{2\cos^2 \beta-\cos \beta-1}{2}$	$\sqrt{\frac{3}{2}}\sin \beta \cos \beta$	$\frac{2\cos^2 \beta+\cos \beta-1}{2}$	$-\frac{\sin \beta(1+\cos \beta)}{2}$
$m = -2$	$\frac{(1-\cos \beta)^2}{4}$	$\frac{\sin \beta(1-\cos \beta)}{2}$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}\sin^2 \beta$	$\frac{\sin \beta(1+\cos \beta)}{2}$	$\frac{(1+\cos \beta)^2}{4}$

84.Feladat: Oldjuk meg a fejezetben vizsgált példát Wigner-függvényekkel is.
 Megoldás: a (110) alapján $\alpha = \gamma = 0$ -nál

$$Y_{10}(\vartheta, \varphi) = d_{0-1}^1(\beta)Y_{1-1}(\vartheta', \varphi') + d_{00}^1(\beta)Y_{10}(\vartheta', \varphi') + d_{01}^1(\beta)Y_{11}(\vartheta', \varphi').$$

A táblázat szerint itt

$$d_{0-1}^1 = \frac{-\sin\beta}{\sqrt{2}} \quad d_{00}^1 = \cos\beta \quad d_{01}^1 = \frac{\sin\beta}{\sqrt{2}}. \clubsuit$$

85.Feladat: A gömbfelületen $\hbar\sqrt{6}$ impulzusmomentumú részecske impulzusmomentum vetületét megmérjük valamilyen \vec{n} irányra. Ezután azokban az esetekben, amikor $+\hbar$ -t kapunk eredményül, a vetületmérést megismételjük egy másik \vec{v} irányra, amely az \vec{n} -el β szöget zár be. Az eljárást sok azonos állapotú részecskével megismételjük. Mi lesz a \vec{v} irányú vetület átlagértéke?

Megoldás: A koordinátarendszert válasszuk úgy, hogy a z -tengely mutasson \vec{n} irányba, a \vec{v} irány feködjön az xz -síkban és ν_x legyen pozitív.

A $\hbar\sqrt{6}$ mutatja, hogy a részecske $l = 2$ mellékkvantumszámú állapotban van. Az \vec{n} irányú vetületméréssel olyan részecskéket választunk ki, amelyeknek a hullámfüggvénye $Y_{21}(\vartheta, \varphi)$. A \vec{v} irányú vetületet jelöljük $\hbar m'$ -vel. Az m' érték találati valószínűsége $W'_{m'} = |d_{1m'}^2(\beta)|^2$, a talált m' -k átlaga pedig

$$\langle m' \rangle = 2 \cdot (W'_2 - W'_{-2}) + 1 \cdot (W'_1 - W'_{-1}) + 0 \cdot W'_0.$$

A táblázat alapján

$$W'_2 - W'_{-2} = \frac{1}{4} \sin^2 \beta [(1 + \cos \beta)^2 - (1 - \cos \beta)^2] = \sin^2 \beta \cos \beta$$

$$W'_1 - W'_{-1} = \frac{1}{4} [(2 \cos^2 \beta + \cos \beta - 1)^2 - (2 \cos^2 \beta - \cos \beta - 1)^2] = (2 \cos^2 \beta - 1) \cos \beta.$$

Ennek alapján egyszerű trigonometriai átalakítások után kapjuk a

$$\langle \hbar m' \rangle = \hbar \cdot \cos \beta$$

végeredményt. Mint látjuk, az impulzusmomentum z -tengelyre vetett vetületének átlagértéke általában nem egyenlő \hbar egész számú többszörösével⁴³.♣

Emlékeztetünk rá, hogy a „régii kvantumelmélet” számára megoldhatatlan problémát jelentett az impulzusmomentum z -komponensének a kvantáltsága. A kvantáltság ugyanis azt fejezte ki, hogy a Bohr-pályák síkja csak meghatározott szögeket zárhatott be a z -tengellyel. A koordinátarendszer azonban csak a fejünkben létezik, bármelyik

⁴³Ld. a 21.fejezetet.

térbeli irányt tekinthetjük z -tengelynek, és nyilvánvalóan lehetetlen, hogy egy adott Bohr-pálya minden térbeli iránnyal megengedett szöveget zárjon be.

A kvantummechanikában is érvényes, hogy ha az impulzusmomentum vetületét bármely térbeli irányra megmérjük, a \hbar egész számú többszörösét kapjuk eredményül. Ezt azonban nem kell úgy érteni, hogy az impulzusmomentumnak kvantált értékű vetülete *van* egyszerre minden térbeli irányra. Csak annyi bizonyos, hogy ha valamelyik vetületet *megmérjük*, a mérés eredménye \hbar egész számú többszöröse lesz.

Figyeljük meg, hogy míg a Bohr-Sommerfeld modellben az impulzusmomentumvetület kvantáltsága *logikai ellentmondást* fejez ki (a koordinátarendszer egyrészt önkényes, másrészt csak bizonyos meghatározott helyzeteket vehet fel a pályákhoz képest, tehát mégsem önkényes), a kvantumelméletben a vetület kvantáltsága csak paradoxális, de nem illogikus. Azért érezzük paradoxálisnak, mert az elektront — akaratlanul — kis mozgó tömegpontnak *képzünk el*, amelynek minden pillanatban van valamikora impulzusmomentum vetülete minden irányra. A Bohr-Sommerfeld modellben valóban ez volt a helyzet, az elektron kis keringő tömegpont volt, hiszen a Bohr-Sommerfeld kvantumfeltétel éppen ezen a képen alapult. A kvantumelméletben azonban ez a kép egyáltalán nem érvényes: a kvantummechanikai mozgásban a klasszikusan egymást kizáró lehetőségek (az adott esetben az impulzusmomentumvetületének különféle értékei) nem zárják ki egymást.

3.52. A spin

Eddig a tömegpont *pályaimpulzusmomentumáról* volt szó, amely a helyzetváltoztatás (transzlációs mozgás) következménye⁴⁴. A klasszikus mechanikában azonban lehet impulzusmomentuma egy olyan testnek is, amely egy helyben marad (rögzített pont körül forog). Az általános eset az, amikor mindkét impulzusmomentum egyszerre van jelen (gondoljunk a Föld keringéséből és tengely körüli forgásából származó impulzusnyomatékára).

Egy olyan tömegpontnak, amelynek az x , y , z koordinátákon kívül nincs más szabadsági foka, csak pályaimpulzusmomentuma lehet. Tengely körüli forgás ugyanis csak akkor lehetséges, ha a testnek vannak olyan további szabadsági fokai is (az Euler-szögek), amelyek a térbeli orientációt határozzák meg. „Forgáson” éppen ezek időbeli változását értjük.

A kvantummechanikában is van lehetőség arra, hogy egy tömegpontnak legyen olyan impulzusmomentuma, amely *nem* a helyváltoztatás következménye, de — a klasszikus mechanikától eltérően — ehhez már *egyetlen* új szabadsági fok is elegendő. Ezt az impulzusmomentumnak azok a különleges kvantumfizikai tulajdonságai teszik lehetővé, amelyeket az előző fejezetekben a pályaimpulzusmomentummal kapcsolatban ismertünk meg. Az olyan részecskéket, amelyek ezzel a legegyszerűbb fajta „belső” impulzusmomentummal rendelkeznek, továbbra is tömegpontoknak fogjuk nevezni.

⁴⁴Matematikailag ez abban fejeződik ki, hogy az \vec{L} — a klasszikus- és a kvantummechanikában egyaránt — az impulzus függvénye.

Az egyetlen új szabadsági fok segítségével bevezetett impulzusmomentumot *spinnek* nevezzük. Tegyük fel, hogy a pályaimpulzusmomentum előző fejezetben megállapított alapvető kvantumfizikai tulajdonságai érvényesek az impulzusmomentum minden fajtájára, így a spinre is⁴⁵. A következő tulajdonságokról van szó:

1) Az impulzusmomentum nagysága kvantált, és egyszerre csak egyetlen térbeli irányra vetett vetülete adható meg, amely ugyancsak kvantált értékű.

2) Amikor új koordinátarendszerre térünk át, a különböző spinvetületű komponensek transzformációs szabálya megegyezik a különböző pályamomentum vetületű komponensek (109), (110) transzformációs szabályával (részletesebben ld. a következő fejezetben).

Tegyük fel tehát, hogy egy tömegpont (egy adott típusú elemi részecske) spinjének a nagysága $\hbar\sqrt{s(s+1)}$ -el egyenlő, ahol s a *spinkvantumszám*, a korábbi l kvantumszám megfelelője. Ezt röviden úgy fejezzük ki, hogy a részecske s spinű. Egy adott típusú elemi részecske s spinkvantumszáma a tömeghez és a töltéshez hasonlóan a részecskére jellemző rögzített paraméter (szemben l -el, amely tetszőleges nemnegatív egész értéket fölvehet). A spin z -tengelyre vetett vetülete $\hbar m_s$ -el egyenlő, ahol az m_s kvantumszám $2s + 1$ különböző értéket vehet fel a $-s \leq m_s \leq s$ intervallumból.

A spinnek — mint *impulzusmomentum* vektornak — a helyzetét a kvantummechanika szerint nem lehetséges részletesebben meghatározni, mint a z -tengelyre vetett vetületének a megadásával. Ezért ha magát ezt a vetületet — pontosabban a vetületet meghatározó kvantumszámot — tekintjük új koordinátának, akkor ennek a koordinátának a megadásával a spinállapotot a lehető legkimerítőbben jellemeztük.

Legyen tehát az új *spinkoordináta* az m_s szám, ami $2s + 1$ diszkrét értéket vehet fel a $(-s, s)$ intervallumból. Az s -spinű részecske hullámfüggvénye eszerint

$$\psi(x, y, z, m_s)$$

alakú. Ennek a hullámfüggvénynek a fizikai jelentését a Born-hipotézis megfelelő kiterjesztésével adhatjuk meg: Annak valószínűsége, hogy a tömegpontot a tér x, y, z koordinátájú pontjának $d\Omega$ környezetében észleljük, és a z -tengelyre vetett spinvetületét $\hbar m_s$ -nek találjuk, $w(x, y, z, m_s) \cdot d\Omega$ -val egyenlő, ahol

$$w(x, y, z, m_s) = |\psi(x, y, z, m_s)|^2.$$

Ez a formula feltételezi, hogy a skalárszorzat és a normálási feltétel az m_s szerinti összegzést is tartalmazza:

$$(\vec{\psi}, \vec{\phi}) = \sum_{m_s=-s}^s \int d\Omega \cdot \psi(x, y, z, m_s)^* \phi(x, y, z, m_s).$$

Egy *diszkrét* függvényargumentumot mindig tekinthetünk — argumentum helyett — *indeksznek* és ez a megszokottabb felfogásmód. (Egy *folytonos* indexszet viszont

⁴⁵Ez a feltevés utólag igazolódik azáltal, hogy az impulzusmomentum olyan általános elméletébe foglalható, amely a forgatások geometriai tulajdonságain alapul és az érvényességét hatalmas tapasztalati anyag bizonyítja.

természetesebb függvényargumentumként kezelni — a 17. fejezetben ezzel az érveléssel értelmeztük át a folytonos indeksű vektorkomponenseket hullámfüggvényé.) Természetesen az, hogy az m_s diszkrét változó indexsz vagy függvényargumentum, a lényegét egyáltalán nem érinti, de a matematikai beidegződéseink miatt célszerűbb, ha a továbbiakban inkább indexsznek tekintjük:

$$\psi(x, y, z, m_s) \longrightarrow \psi_{m_s}(x, y, z),$$

a valószínűségi sűrűség és a skalárszorzat pedig

$$w(x, y, z, m_s) = |\psi_{m_s}(x, y, z)|^2,$$

$$(\vec{\psi}, \vec{\phi}) = \sum_{m_s=-s}^s \int d\Omega \cdot \psi_{m_s}(x, y, z)^* \phi_{m_s}(x, y, z).$$

Egy s -spinű tömegpont hullámfüggvénye tehát egy $2s + 1$ komponensű oszlop. Az 1. komponens absz. érték négyzete annak valószínűségét adja meg, hogy a spin z -vetületét $\hbar s$ -nek, a 2. komponensé azt, hogy $\hbar(s-1)$ -nek, s í.t. a $(2s+1)$ -ik komponensé pedig azt, hogy ezt a vetületet $-\hbar s$ -nek találjuk.

Arra az elég meglepő következtetésre jutottunk, hogy a klasszikus mechanika forgási impulzusmomentumának megfelelő tulajdonság a kvantumelméletben egyszerűen abban fejeződik ki, hogy a hullámfüggvény többkomponensű. Ha pl. a hullámfüggvény vektormező, akkor a részecskének, amit leír, 1-s spinje van. Ekkor lesz a komponensek száma éppen három, és egy vektor transzformációs törvénye azonos az Y_{1m} gömbfüggvények transzformációs törvényével. Ez abból következik, hogy — mint az 50. fejezetben láttuk, — az Y_{1m} -k az \vec{r} helyzetvektor x, y, z komponenseinek a lineárkombinációi.

Az s a pályamomentum l kvantumszámának az analogonja, és eszerint valamilyen egész számnak kell lennie. Ebből az következik, hogy egy hullámfüggvénynek csak páratlan számú komponense lehet, és ez szöveget üt az ember fejébe. Miért ne lehetne pl. kétkomponensű hullámfüggvény is? A gyanú jogos: az, hogy az impulzusmomentum nagyságát meghatározó kvantumszám csak egész értékeket vehet föl, a pályaimpulzusmomentum specifikuma, annak következménye, hogy l -t az x, y, z -től függő polinómok tulajdonságai határozzák meg. A spinnek azonban nincs köze a koordinátákhoz, és ennek következtében — mint látni fogjuk, — az egész értékek mellett félegész értékeket is felvehet: $s = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$. Az $-s \leq m_s \leq s$ képlet félegész s -nél is érvényes, de ekkor az m_s -k maguk is félegészek. A komponensek száma minden s -nél $(2s + 1)$ -el egyenlő. Félegész s -nél ez a szám páros. A következő fejezetben a spin lehetséges nagyságára vonatkozó kérdést tiszta matematikai feladatként fogalmazzuk meg és ismertetjük az általános megoldás legfontosabb következtetéseit.

3.53. A forgatások és ábrázolásaik

A feladat tehát az, hogy az s lehetséges értékeit olyan új gondolatmenet alapján állapítsuk meg, amely nem a pályamomentumon alapul. Induljunk ki abból, hogy a

hullámfüggvény többkomponensű, és próbáljuk megérteni, miféle szempont korlátozhatja a komponensek számát.

Legyen $\psi(x, y, z)$ n -komponensű, $\psi_i(x, y, z)$ komponensekkel ($i = 1, 2, \dots, n$). Vegyünk egy tetszőleges P pontot, helyezzük a koordináta-rendszer orióját P -be, és kérdezzük meg, mi történik a P -beli $\psi(0, 0, 0) \equiv \psi$ -vel, amikor a koordináta-rendszert elforgatjuk.

Csak az történhet, hogy a ψ komponensei megváltoznak úgy, hogy az új komponensek a régiek lineáris kombinációi. Komponensekben és mátrixalakban ezt így írhatjuk fel:

$$\begin{aligned}\psi'_i &= \sum_{j=1}^n R_{ij} \psi_j, \\ \psi' &= \hat{R} \psi.\end{aligned}\tag{112}$$

Az \hat{R} mátrix elemei az elforgatást meghatározó α, β, γ Euler-szögek függvényei.

Kérdés: Bizonyos-e, hogy minden n -nél lesz olyan $\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)$ mátrix, amely a forgatások hatását korrekt módon *ábrázolja*?

Két egymás után elvégzett forgatás ugyanis újra egy forgatás, amelynek az Euler-szögeit az adott sorrendben vett két forgatás Euler-szögei határozzák meg (a forgatások *csoportot* alkotnak). Az eredő elfordulást meghatározó formulák bonyolultak, csupán az illusztráció kedvéért írjuk fel őket:

$$\begin{aligned}\operatorname{ctg}(\alpha - \alpha_1) &= \cos \beta_2 \cdot \operatorname{ctg}(\alpha_1 + \gamma_2) + \operatorname{ctg} \beta_1 \cdot \frac{\sin \beta_2}{\sin(\alpha_1 + \gamma_2)} \\ \cos \beta &= \cos \beta_1 \cdot \cos \beta_2 - \sin \beta_1 \cdot \sin \beta_2 \cdot \cos(\alpha_1 + \gamma_2) \\ \operatorname{ctg}(\gamma - \gamma_1) &= \cos \beta_1 \cdot \operatorname{ctg}(\alpha_1 + \gamma_2) + \operatorname{ctg} \beta_2 \cdot \frac{\sin \beta_1}{\sin(\alpha_1 + \gamma_2)}.\end{aligned}$$

Most meg tudjuk mondani pontosan, mikor *ábrázolja* az $\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)$ mátrix a forgatásokat. Akkor, ha a következő két számítás ugyanarra az eredményre vezet:

1) Az $\hat{R}(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1)$ segítségével kiszámítjuk a ψ első forgatás utáni komponenseit, majd ezekre az új komponensekre $\hat{R}(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2)$ -vel hatva kiszámítjuk a két egymásutáni forgás utáni komponenseket;

2) Az eredő elfordulás fenti formulái alapján kiszámítjuk az α, β, γ eredő Euler-szögeket, és az eredeti ψ komponenseiből az $\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)$ segítségével számítjuk ki az újakat.

Formulában:

$$\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) = \hat{R}(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2) \cdot \hat{R}(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1)\tag{113}$$

(a jobboldalon mátrixszorzás értendő).

Ez a feltétel nagyon kemény. Csak $n = 3$ -nál könnyű kielégíteni, mert a vektor transzformációs törvénye a szemlélet számára nyilvánvaló. Az általános esetben azonban a szemlélet nem nyújt segítséget⁴⁶.

⁴⁶Itt jegyezzük meg, hogy n -komponensű mennyiségről csak akkor beszélhetünk, ha a komponensek

A feladatot — ennek ellenére — sikerült teljes általánosságában megoldani. Az eredmény a következő pontokban foglalható össze:

1) Ha találunk 3 olyan $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$ $n \times n$ -s mátrixot, amelyek kielégítik az

$$\left. \begin{aligned} \hat{M}_x \cdot \hat{M}_y - \hat{M}_y \cdot \hat{M}_x &= i\hat{M}_z \\ \hat{M}_y \cdot \hat{M}_z - \hat{M}_z \cdot \hat{M}_y &= i\hat{M}_x \\ \hat{M}_z \cdot \hat{M}_x - \hat{M}_x \cdot \hat{M}_z &= i\hat{M}_y \end{aligned} \right\} \quad (114)$$

relációkat, akkor ezekből kiindulva mindig megkonstruálható az forgáscsoportot ábrázoló $\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)$ $n \times n$ -s mátrix-függvény. Az \hat{M}_i mátrixokat ezért az \hat{R} ábrázolás *generátorainak* nevezzük.

2) Minden n -nél található végtelen sok ilyen mátrix-hármas. Ezek azonban csak a koordináta-bázis választásában különböznek egymástól, alkalmas bázisválasztással azonos alakra hozhatók. A standard alak két legfontosabb tulajdonsága az, hogy mindhárom mátrix hermitikus (19. fejezet), ezen belül \hat{M}_z diagonális és diagonális elemei csökkenő sorrendben következnek. Így végül is minden n -nél egy és csakis egy olyan mátrixhármas van, amelyik eleget tesz (114)-nek, és — ennek megfelelően, — csak egy standard alakú $\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)$ mátrix-függvény, amely kielégíti (113)-t.

86. Feladat: mutassuk meg, hogy az

$$\hat{M}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{M}_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{M}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

mátrixok standard alakú generátorok.

Megoldás: Az \hat{M}_z standard alakú, mert diagonális, és a diagonális elemei rendre $+1, 0, -1$. A mátrixszorzások elvégzésével (114) teljesülése könnyen igazolható. ♣

3) $n = 2s + 1$ -nél a standard alakú \hat{R} a

$$D_{m_s m'_s}^s(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-im_s \alpha} d_{m_s m'_s}^s(\beta) e^{-im'_s \gamma}$$

Wigner-függvényekből képzett mátrix (transzponáltja).

A (109), (110) képletek megfelelői a következők:

$$\psi'_{m'_s} = \sum_{m_s=-s}^s \psi_{m_s} \cdot D_{m_s m'_s}^s(\alpha, \beta, \gamma), \quad (115)$$

$$\psi_{m_s} = \sum_{m'_s=-s}^s D_{m_s m'_s}^{s*}(\alpha, \beta, \gamma) \cdot \psi'_{m'_s}. \quad (116)$$

nem választhatók szét csoportokra úgy, hogy az egyes csoportokon belüli komponensek mindig csak egymás között kombinálódnak. Két vektor hat komponensét nem hatkomponensű mennyiségnek tekintjük, hanem két háromkomponensűnek.

Az egész és a félegész indeksű Wigner-függvények között van egy markáns különbség: egész indeksnél minden forgatáshoz egyetlen mátrix tartozik, félegésznél azonban kettő, amelyek előjelben különböznek egymástól. Az α, β, γ Euler-szögű forgatás ugyanaz, mint amit az $\alpha + 2\pi, \beta, \gamma$ határoz meg. A fenti képlet alapján azonban a $D_{m_s m'_s}^s(\alpha, \beta, \gamma)$ és a $D_{m_s m'_s}^s(\alpha + 2\pi, \beta, \gamma)$ függvény félegész s -nél — amikor m_s is félegész —, az $e^{-im_s \alpha}$ faktor miatt előjelben különbözik egymástól:

$$e^{-im_s(\alpha + 2\pi)} = e^{-im_s \cdot 2\pi} \cdot e^{-im_s \alpha} = -e^{-im_s \alpha} \quad (m_s \text{ félegész}).$$

Ha a ψ komponensei maguk megfigyelhető mennyiségek volnának, ez a kétértékűség elegendő ok volna arra, hogy páros számú komponensből álló mennyiségek ne létezhesse. Valóban, ebben az esetben a koordináta-rendszer 2π szögű elforgatásával be lehetne bizonyítani, hogy $\psi = -\psi$, azaz $\psi = 0$. A kvantumelméletben azonban nem okoz problémát, ha a hullámfüggvény csak előjel erejéig van meghatározva. A kvantumelmélet szerint ugyanis a ψ csak a $|\psi|^2$ -t tartalmazó valószínűségeken keresztül figyelhető meg, és ez a kombináció mentes az előjelbizonytalanságtól. *Ezért* nincs megtiltva, hogy a hullámfüggvénynek lehessen páros számú komponense is.

A klasszikus fizika mennyiségei azonban maguk észlelhetők a hatásaikon keresztül (nem valószínűségi természetűek), ezért a klasszikus fizikában találunk 1-komponensű *skalárokat*, 3-komponensű *vektorokat*, 5-komponensű *tenzorokat* — egyszóval páratlan komponensű mennyiségeket⁴⁷ —, de páros komponensből álló *spinorokat* nem.

3.54. A feles spin ($s = 1/2$)

A stabil anyag minhárom alkotóeleme — az elektron, a proton és a neutron —, feles spinű, ezért a feles spin elmélete kiemelkedő szerepet játszik a kvantummechanikában. A továbbiakban csak ezt tárgyaljuk.

Az $s = 1/2$ -hez tartozó generátorok a (26) képletben bevezetett Pauli-mátrixok $1/2$ -szeresei: $\hat{M}_i = 1/2 \cdot \sigma_i$ ($i = x, y, z$). Ezek valóban eleget tesznek a standard generátorokra kirótt feltételeknek (ld. a 24.feladatot) és a forgások $D_{m_s m'_s}^{1/2}$ Wigner-függvények által történő ábrázolását generálják.

Egy feles spinű részecske hullámfüggvénye a

$$\psi(x, y, z, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(x, y, z, t) \\ \psi_2(x, y, z, t) \end{pmatrix} \quad (117)$$

kétkomponensű spinor. Annak valószínűségi sűrűsége, hogy a részecskét a t pillanatban az x, y, z koordinátájú pont körüli $d\Omega$ tartományban találjuk és a spin z -vetülete

⁴⁷A páros komponensű mennyiségeket spinoroknak, a páratlan komponensűeket tenzoroknak nevezzük. A skalár és a vektor a tenzor két speciális esete.

$+\hbar/2$, ill $-\hbar/2$ legyen, $w_{1/2}$ -el és $w_{-1/2}$ -el egyenlő:

$$w_{1/2} = |\psi_1(x, y, z, t)|^2 \quad w_{-1/2} = |\psi_2(x, y, z, t)|^2.$$

A következő lépés az, hogy bevezessük a spinnel, mint fizikai mennyiségekkel kapcsolatos operátorokat oly módon, hogy legyenek összhangban a kvantummechanika általános elveivel, valamint azzal, amit a spinről eddig mondottunk.

A koordinátákkal való szorzás és a parciális deriválás mellett olyan operátoraink is lesznek, amelyek a mátrixszorzás szabályai szerint a spinkoordinátákra (a hullámfüggvény indexére) hatnak. A spin z -komponensének az operátorát a komponensek már ismert fizikai jelentése alapján azonnal fel tudjuk írni:

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z = \begin{pmatrix} +\hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix}. \quad (118)$$

Ez a képlet így indokolható: A mátrixszorzás szabálya szerint

$$\hat{S}_z\psi = \begin{pmatrix} +\hbar/2 \cdot \psi_1 \\ -\hbar/2 \cdot \psi_2 \end{pmatrix}.$$

Ha $\psi_2 = 0$, akkor ez a képlet $\hat{S}_z\psi = +\hbar/2 \cdot \psi$ alakúvá válik, vagyis ez a speciális ψ az \hat{S}_z operátor $+\hbar/2$ sajátértékhez tartozó sajátfüggvénye⁴⁸. A kvantummechanika általános elvei szerint ebből az következik, hogy az olyan hullámfüggvényű állapotban, amelyben csak a felső komponens különbözik zérustól, a spin z -komponense $+\hbar/2$ -vel egyenlő. Ez valóban így is van, hiszen ekkor $w_{-1/2} = 0$.

Hasonlóan, amikor a ψ -nek csak alsó komponense van, akkor az \hat{S}_z operátor $-\hbar/2$ -höz tartozó sajátfüggvénye.

Egy olyan ψ spinor, amelynek egyik komponense sem zérus, nem sajátfüggvénye \hat{S}_z -nek, hanem az \hat{S}_z operátor w_{\pm} normált sajátspinorjainak a lineárkombinációja:

$$w_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad w_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (w_+, w_-) = 1$$

$$\sigma_z w_{\pm} = \pm w_{\pm} \quad \longrightarrow \quad \hat{S}_z w_{\pm} = \pm \hbar/2 w_{\pm}$$

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \psi_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \psi_1 w_+ + \psi_2 w_-.$$

A Born hipotézis segítségével ebből a képletből is leolvasható, hogy $w_{1/2} = |\psi_1|^2$ és $w_{-1/2} = |\psi_2|^2$.

Keressük meg most az \vec{S} x és y komponensét. A következő szempontokat kell figyelembe venni:

⁴⁸Pontosabb lenne a sajátspinor elnevezés.

1) Feles spinnél $\hat{M}_i = 1/2 \cdot \sigma_i$. Az \hat{M}_i -k a geometriai elmélet generátorai és a három \hat{M}_i komponens nyilván teljesen egyenértékű.

2) Az \hat{S}_i komponensei szintén egyenértékűek egymással.

3) Az \hat{S}_z az $\hat{M}_z = 1/2 \cdot \sigma_z$ generátor \hbar -szorosa.

Ezeknek a szempontoknak az alapján aligha vitatható, hogy az

$$\hat{S}_i = \hbar \hat{M}_i \quad (119)$$

egyenlőségnek $i = x, y, z$ -nél (és minden n -nél!) egyaránt érvényesnek kell lennie. A (119) mellett további nyomós érv, hogy fennállása esetén az $\vec{\hat{S}}$ komponensei az (114) következtében *ugyanolyan típusú csererelációknak tesznek eleget, mint \vec{L} komponensei*:

$$\left. \begin{aligned} [\hat{S}_x, \hat{S}_y] &= i\hbar S_z \\ [\hat{S}_y, \hat{S}_z] &= i\hbar S_x \\ [\hat{S}_z, \hat{S}_x] &= i\hbar S_y. \end{aligned} \right\} \quad (120)$$

Speciálisan $s = 1/2$ -nél

$$\hat{S}_x = \hbar/2 \cdot \sigma_x \quad \hat{S}_y = \hbar/2 \cdot \sigma_y \quad \hat{S}_z = \hbar/2 \cdot \sigma_z, \quad (121)$$

amelyre (120) teljesül (ld. a 24.feladatot). Ezek az operátorok hermitikusak (29.feladat), a sajátértéke mindháromnak $\pm\hbar/2$ -vel egyenlő (35.feladat). Mindez arra mutat, hogy a spinoperátorok (121) szerinti megválasztása korrekt.

87.Feladat: Keressük meg az \hat{S}^2 operátort.

Megoldás: A 23.feladatban láttuk, hogy $\sigma_i^2 = I$ (egységmátrix), ezért

$$\hat{S}^2 = 3 \cdot \frac{\hbar^2}{4} = \hbar^2 \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \cdot I.$$

Az \hat{S}^2 -nek tehát egyetlen sajátértéke van ($3\hbar^2/4$), ami — mint várható, — $\hbar^2 s(s+1)$ -el egyenlő. ♣

88.Feladat: Keressük meg az \hat{S}_x és a \hat{S}_y sajátspinorjait.

Megoldás: A 35.feladat felhasználásával

$$\begin{aligned} \hat{S}_x u_{\pm} &= \pm \hbar/2 \cdot u_{\pm} & u_{\pm} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\ \hat{S}_y v_{\pm} &= \pm \hbar/2 \cdot v_{\pm} & v_{\pm} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \pm \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad \clubsuit \end{aligned}$$

A feles spinnel rendelkező részecske hullámfüggvényére ható operátorok készlete tehát kibővült a három \hat{S}_i -vel. Ezek kommutálnak a korábbi hat független \hat{x} , \hat{y} , \hat{z} , \hat{p}_x , \hat{p}_y , \hat{p}_z operátor mindegyikével. Erről könnyű meggyőződni. Például \hat{S}_x és \hat{p}_x felcserélhetősége a

$$\sigma_x \cdot \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \\ \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \\ \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \end{pmatrix},$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \sigma_x \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \psi_2 \\ \psi_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \\ \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \end{pmatrix}$$

kifejezések egyenlőségének a következménye.

Amikor a részecske spinállapota a tér minden pontjában minden időpillanatban ugyanaz, akkor a hullámfüggvény a

$$\psi(x, y, z, t) = f(x, y, z, t) \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

szeparált alakú, konstans spinorkomponensekkel (a spinort normálnak tételezzük fel: $|a|^2 + |b|^2 = 1$). Egy ilyen hullámfüggvénynél a spinállapot valóban állandó, hiszen akárhol találjuk a tömegpontot, minden t -ben $|a|^2$ -el és $|b|^2$ -el egyenlő annak valószínűsége, hogy m_s -t $+1/2$ -nek, illetve $-1/2$ -nek találjuk.

Például a szabadon mozgó feles spinű részecskénél ez a helyzet:

$$\psi(x, y, z, t) = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}.$$

Ilyen esetekben a spinállapot vizsgálatánál el fogunk tekinteni a hullámfüggvény koordináta- és időfüggő részének az állandó kiírásától. Az alábbi feladatot már így kell érteni.

89.Feladat: Mérjük meg a részecske z -irányú spinvetületét és azokban az esetekben, amikor $+\hbar/2$ -nek találjuk, mérjük meg az x -irányú vetületet. Határozzuk meg a mérési eredmények valószínűségeit.

Megoldás: Az első lépésben szelektált részecskék állapotfüggvénye w_+ . Fejtsük ki ezt az \hat{S}_x sajátállapotai szerint:

$$w_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}u_+ + \frac{1}{\sqrt{2}}u_-.$$

A Born hipotézis szerint annak valószínűsége, hogy az x -komponenst $\pm\hbar/2$ -nek találjuk, $W_{\pm} = 1/2$ -el egyenlő.♣

Amikor a részecske spinvetülete a z -irányra $+\hbar/2$ -vel egyenlő (vagyis a hullámfüggvénye w_+), azt mondjuk, hogy $+z$ irányban *polarizált*. A w_- állapotban a polarizáció iránya $-z$. Azt gondolhatnánk, hogy csak bizonyos speciális spinorok írják le polarizált részecskét, de ez nincs így. Megmutatható, hogy *minden* kétkomponensű spinorhoz megtalálható az az \vec{n} irány a térben, amely a részecske polarizációs iránya. Ez azt jelenti, hogy ha az \vec{n} irányú spinvetületet mérjük, akkor azt határozottan $+\hbar/2$ -nek találjuk. Ezt a tényt úgy is kifejezhetjük, hogy az adott spinor az $\hat{S}_n = (\vec{n} \cdot \vec{S})$ operátor $+\hbar/2$ sajátértékhez tartozó sajátspinorja:

$$\hat{S}_n \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \hbar/2 \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}.$$

Az állítás jobb megértését talán elősegíti, ha felírjuk (bizonyítás nélkül) azt a képletet, amellyel az \vec{n} polarizációs irányt hozzá lehet rendelni egy spinorhoz:

$$\vec{n} = (\langle \sigma_x \rangle, \langle \sigma_y \rangle, \langle \sigma_z \rangle) \equiv \langle \vec{\sigma} \rangle.$$

A szögletes zárójelek átlagképzést jelölnek (48.feladat). Ha az a, b komponensekkel rendelkező spinort ψ -vel jelöljük, akkor pl.

$$\langle \sigma_x \rangle = (\psi, \sigma_x \psi) = \psi_1^* (\sigma_x \psi)_1 + \psi_2^* (\sigma_x \psi)_2 = a^* b + b^* a.$$

Ha a ψ normált, akkor az így definiált \vec{n} egységvektor.

Az anszamblok nyelvén (27.fejezet) az állításunkat úgy is megfogalmazhatjuk, hogy *a feles spinű részecskék tiszta állapotú anszamblja mindig polarizált valamilyen irányban*. A keverék ellenben részlegesen polarizált (vagy polarizálatlan) nyalábot ír le (ld. lentebb a 91.feladatot).

Miután adott kétkomponensű spinorhoz már meg tudjuk találni a polarizáció irányát, nézzük meg a fordított feladatot is: keressük meg azt a kétkomponensű spinort, amely adott \vec{n} irányban polarizált részecske hullámfüggvénye. Ezt a feladatot legegyszerűbben a $D_{m_s m'_s}^{1/2}$ Wigner-függvények segítségével oldhatjuk meg, amelyek a kétkomponensű spinorok transzformációját határozzák meg a koordinátarendszer elforgatásakor.

Az alábbi táblázat magukat az $1/2$ -indekszű Wigner-függvényeket tartalmazza:

A $D_{m_s m'_s}^{1/2}$ Wigner-függvények.

	$m'_s = 1/2$	$m'_s = -1/2$
$m_s = 1/2$	$e^{-i\alpha/2} \cdot \cos \frac{\beta}{2} \cdot e^{-i\gamma/2}$	$-e^{-i\alpha/2} \cdot \sin \frac{\beta}{2} \cdot e^{i\gamma/2}$
$m_s = -1/2$	$e^{i\alpha/2} \cdot \sin \frac{\beta}{2} \cdot e^{-i\gamma/2}$	$e^{i\alpha/2} \cdot \cos \frac{\beta}{2} \cdot e^{i\gamma/2}$

Keressük meg tehát a megadott \vec{n} irányban polarizált részecske ψ_n spinorját (az \hat{S}_n operátor $+\hbar/2$ sajátértékhez tartozó sajátspinorját) abban a \mathcal{K} koordinátarendszerben, amelyben az \vec{n} irányt megadtuk. Az \vec{n} -t specializáljuk annyiban, hogy feküdjön az xz -síkban és x -komponense legyen pozitív.

Ekkor abban a \mathcal{K}' -ben, amelynek \vec{OZ}' tengelye \vec{n} irányú (és $\vec{OY}' \parallel \vec{OY}$), a részecske hullámfüggvénye w_+ . Ez a \mathcal{K}' nyilván $\alpha = \gamma = 0$, $\beta = \arcsin n_x$ Euler-szögű forgatással kapható \mathcal{K} -ből, ezért (115) alapján

$$\psi_{nm_s} = \sum_{m'_s=-1/2}^{1/2} D_{m_s m'_s}^{1/2*}(0, \beta, 0) \cdot \psi'_{nm'_s} = D_{m_s 1/2}^{1/2*}(0, \beta, 0)$$

(felhasználtuk, hogy $\psi' = w_+$ -nak az alsó komponense 0, a felső komponense pedig 1).

A táblázat segítségével kapjuk a ψ_n komponenseit:

$$\psi_{n 1/2} = D_{1/2 1/2}^{1/2*}(0, \beta, 0) = \cos \frac{\beta}{2} \quad \psi_{n -1/2} = D_{-1/2 1/2}^{1/2*}(0, \beta, 0) = \sin \frac{\beta}{2},$$

vagyis

$$\psi_n = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \quad \vec{n} = (\sin \beta, 0, \cos \beta), \quad 0 \leq \beta \leq \pi. \quad (122)$$

Ha ebben a gondolatmenetben w_+ -t w_- -al helyettesítjük, akkor a $-\vec{n}$ irányban polarizált részecske ψ_{-n} spinorját kapjuk meg:

$$\psi_{-n} = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\beta}{2} \\ \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \quad \vec{n} = (\sin \beta, 0, \cos \beta), \quad 0 \leq \beta \leq \pi. \quad (123)$$

Egyszerű trigonometrikus átalakítással igazolható, hogy $\hat{S}_n \psi_{\pm n} = \pm \frac{\hbar}{2} \psi_{\pm n}$, ahol — mint már szó volt róla, —

$$\hat{S}_n = (\vec{n} \cdot \vec{S}) = \begin{pmatrix} \cos \beta & \sin \beta \\ -\sin \beta & \cos \beta \end{pmatrix} \quad (\psi_{+n} \equiv \psi_n).$$

Ezek a képletek a következőt mutatják: Ha egy részecske a z -tengellyel β szöget bezáró \vec{n} irányban polarizált, akkor a z -irányú spinvetület méréskor $\cos^2 \frac{\beta}{2}$ valószínűséggel $+\hbar/2$ -t, $\sin^2 \frac{\beta}{2}$ valószínűséggel $-\hbar/2$ -t kapunk eredményül. Ezt egy kissé más formában a következő feladatban foglalkozunk össze:

90.Feladat: Mi a $W_{\pm}(\vec{n})$ és a $W_{\pm}(-\vec{n})$ valószínűsége annak ($\vec{n} = (\sin \beta, 0, \cos \beta)$), hogy az \vec{n} és a $-\vec{n}$ irányban polarizált részecske z -tengelyre vetett spinvetületét $\pm \hbar/2$ -nek találjuk?

Megoldás: A (122) és a (123) alapján

$$\begin{aligned} \psi_n &= \cos \frac{\beta}{2} \cdot w_+ + \sin \frac{\beta}{2} \cdot w_- \\ \psi_{-n} &= -\sin \frac{\beta}{2} \cdot w_+ + \cos \frac{\beta}{2} \cdot w_- \end{aligned}$$

A valószínűségeket a (59) általános szabály alapján számoljuk:

$$\begin{aligned} W_+(\vec{n}) &= |(w_+, \psi_n)|^2 = \cos^2 \frac{\beta}{2} & W_-(\vec{n}) &= |(w_-, \psi_n)|^2 = \sin^2 \frac{\beta}{2} \\ W_+(-\vec{n}) &= |(w_+, \psi_{-n})|^2 = \sin^2 \frac{\beta}{2} & W_-(-\vec{n}) &= |(w_-, \psi_{-n})|^2 = \cos^2 \frac{\beta}{2}. \end{aligned}$$

♣

91.Feladat: Állítsunk elő keveréket, amelyben a ψ_n és a ψ_{-n} tiszta állapotok p_+ és p_- valószínűséggel fordulnak elő. Mi a W_{\pm} valószínűsége annak, hogy z -irányú spinvetület mérésakor $\pm \hbar/2$ -t kapjunk eredményül?

Megoldás: Az előző feladat eredménye alapján

$$\begin{aligned} W_+ &= p_+ W_+(\vec{n}) + p_- W_+(-\vec{n}) = p_+ \cos^2 \frac{\beta}{2} + p_- \sin^2 \frac{\beta}{2} = \\ &= p_+ \frac{1 + \cos \beta}{2} + p_- \frac{1 - \cos \beta}{2} = \frac{1}{2} [1 + (p_+ - p_-) \cos \beta] \\ W_- &= p_+ W_-(\vec{n}) + p_- W_-(-\vec{n}) = p_+ \sin^2 \frac{\beta}{2} + p_- \cos^2 \frac{\beta}{2} = \\ &= p_+ \frac{1 - \cos \beta}{2} + p_- \frac{1 + \cos \beta}{2} = \frac{1}{2} [1 + (p_- - p_+) \cos \beta]. \end{aligned}$$

Amikor $p_+ = 1$, $p_- = 0$ (vagy megfordítva), a nyaláb polarizált és visszkapjuk a polarizált nyalábra érvényes valószínűségeket. Polarizálatlan nyalábnál ($p_+ = p_- = 1/2$) $W_+ = W_- = 1/2$. A többi esetben a nyalábot *részlegesen polarizáltak* nevezzük.

A koordináta-rendszer z -tengelye és az \vec{n} irány önkényesek. Ezt figyelembe véve a polarizálatlan nyalábra kapott eredményünket a következő két állításban foglalhatjuk össze:

1) A polarizálatlan nyaláb előállítására szempontjából közömbös, hogy az \vec{n} irányt milyennek választjuk (csak egy „polarizálatlan állapot” van).

2) A polarizálatlan nyaláb spinvetületét mérve valamilyen irányra a $\pm\hbar/2$ értékeket az irányválasztástól függetlenül mindig egyenlő valószínűségűnek találjuk. ♣

3.55. A Stern-Gerlach kísérlet (1921)

Ebben a kísérletben igazolták először, hogy az impulzusmomentum vetülete minden térbeli tengelyre kvantált értéket vesz fel. Az eredeti kísérleteket semleges atomokkal végezték. Az alábbiakban a neutronspinre vonatkozó analóg kísérletet ismertetjük.

Ha az impulzusmomentum töltött részecskék mozgásával kapcsolatos, akkor mágneses dipólnyomaték társul hozzá (Elektrodinamika jegyzet 19. fejezet). Láttuk (12. fejezet), hogy a hidrogénatomban keringő elektron mágneses dipólnyomatéka *arányos* a pályamozgás \vec{L} impulzusnyomatékával:

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2m} \vec{L}.$$

Ezért — az általános receptünk szerint, — a mágneses dipólnyomaték *operátora*

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2m} \vec{\hat{L}}.$$

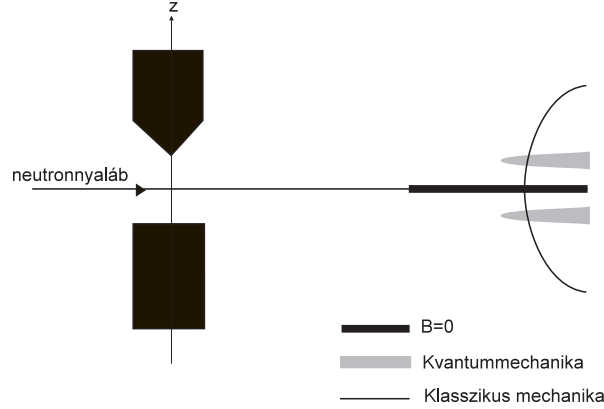
Az elektron relativisztikus Schrödinger-egyenletéből (a Dirac-egyenletből) következik, hogy az elektron spinből származó mágneses nyomatéka nagyon hasonlóan függ össze a spinnel, a tengely-körüli forgás kvantummechanikai megfelelőjével:

$$\vec{\mu} = \frac{e}{m} \vec{\hat{S}}.$$

A proton és a neutron mágneses nyomatékának az operátorát pedig a

$$\begin{aligned} \vec{\mu} &= 2.8 \frac{|e|}{m_p} \vec{\hat{S}} && \text{(protonra)} \\ \vec{\mu} &= -1.9 \frac{|e|}{m_n} \vec{\hat{S}} && \text{(neutronra)} \end{aligned}$$

képletek szerint kell megválasztani ahhoz, hogy a tapasztalatokkal összhangban legyenek⁴⁹.



25. ábra.

A Stern-Gerlach kísérlet azt használja ki, hogy mágneses mező segítségével lehet hatni a mágneses dipólnyomatéokra és ezen keresztül a spinre.

Az Elektrodinamika jegyzet 10.fejezetében láttuk, hogy elektromos mezőben az \vec{r} pontban tartózkodó pontszerű elektromos dipólra az

$$\vec{M} = (\vec{p} \times \vec{E})$$

forgatónyomaték és az

$$\vec{F}(\vec{r}) = (\vec{p} \cdot \vec{\nabla}) \vec{E}(\vec{r})$$

eltérítő erő hat (a \vec{p} az elektromos dipólnyomaték vektora). Ezeknek a képleteknek a mágneses analogonját nem tárgyaltuk, de megjegyeztük (Elektrodinamika jegyzet 19.fejezet), hogy $\vec{p} \rightarrow \vec{\mu}$, $\vec{E} \rightarrow \vec{B}$ helyettesítéssel kaphatók⁵⁰ az elektromos dipólra érvényes képletekből. Eszerint a pontszerű mágneses dipólra ható forgatónyomaték és eltérítő erő képlete a következő:

$$\vec{M} = (\vec{\mu} \times \vec{B})$$

$$\vec{F}(\vec{r}) = (\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}) \vec{B}(\vec{r}) = \mu_x \frac{\partial \vec{B}}{\partial x} + \mu_y \frac{\partial \vec{B}}{\partial y} + \mu_z \frac{\partial \vec{B}}{\partial z}. \quad (124)$$

A kísérletet a klasszikus mechanika és elektrodinamika alapján gondolták ki, ezért először tegyük fel mi is, hogy a neutron egy klasszikus elektromosan semleges tömegpont $\vec{\mu}$ mágneses nyomatékkal, amely a tengely körüli forgás (klasszikus spin) \vec{S}

⁴⁹A neutron mágneses dipólnyomatékának a léte arra mutat, hogy a neutron nem igazán pontszerű, vannak töltött összetevők benne.

⁵⁰Az Elektrodinamika jegyzetben a mágneses dipólnyomatékot \vec{m} -el jelöltük.

impulzusnyomatékával arányos. Azért kell elektromosan semleges részecskét választani, hogy ne hasson rá Lorentz-erő. A nagyon keskeny neutronnyalábot speciális mágnespofák (Stern-Gerlach mágnes) segítségével létrehozott erősen inhomogén mágneses térben engedik keresztül. A nyalábot magát tekintjük y -tengelynek. A mágnespofák kitüntetnek egy irányt, a berendezés „tengelyét” (ezt tekintjük z -iránynak)

azáltal, hogy az x -tengely mentén a \vec{B} és a $\frac{\partial \vec{B}}{\partial z}$ vektornak csak a z -komponense az, ami számottevő. A tengely egybeesik a mágneses tér leggyorsabb változási irányával.

A z -irányú mágneses térben a dipólra ható forgatónyomaték olyan, hogy — konstans μ_z mellett — a dipólnyomaték vektora precesszál a z -irány körül. Ennek következtében a μ_x és a μ_y komponensei átlagban nullák lesznek és az ezekkel arányos tagok az eltérítő erőből eltűnnek. Mindezek alapján az eltérítő erő z -irányú lesz:

$$F \approx F_z = \mu_z \frac{\partial B}{\partial z}.$$

Vizsgáljuk meg, hogyan térülnek el ebben a berendezésben a „klasszikus” neutronok. Ha a nyaláb nincs speciális módon előkészítve, akkor az egyes neutronok (klasszikus!) dipólnyomaték vektorai azonos valószínűséggel mutatnak minden irányba. Az eltérés mértékét és irányát a μ_z komponens nagysága és előjele határozza meg. Egyenletes irányeloszlásnál annál több részecskének van adott μ_z környezetébe eső komponense, minél kisebb ennek a μ_z -nek a nagysága. Ezért ha a mágnestől történő kilépés után a részecskék z -irányú eltérülését regisztráljuk, olyan eloszlást kapunk, amelynek a maximuma az y -tengelyen, a nyaláb eredeti pályájánál van. Röviden ezt úgy fejezhetjük ki, hogy a nyaláb z -tengely mentén csupán *szétkenődik*, de nem hasad fel.

A valóságosan elvégzett kísérlet azonban ettől a klasszikus várakozástól eltérő eredményre vezet. A mágneses tér hatására a nyaláb *kettéválik*, az egyik rész maximuma a $+z$ tengelyen, a másik részé szimmetrikusan a $-z$ tengelyen lesz. Ha preparálatlan nyalábot használunk, akkor a neutronok fele-fele arányban oszlanak meg a résznyalábok között.

Ha most kiválasztjuk a két résznyaláb közül az egyiket, mondjuk azt, amelyik a tengely pozitív irányában (a háromszögletű mágnespofa felé) térült el és ezt egy újabb Stern-Gerlach mágnesen vezetjük keresztül, akkor ennek az újabb mágnesnek a hatása attól a β szögtől fog függni, amit a két berendezés tengelye bezár egymással⁵¹. A második berendezés is két részre választja a ráeső nyalábot, de a két új résznyalábban a neutronszám nem egyenlő: a pozitív irányban eltérített résznyaláb neutronjainak a száma $\cos^2 \frac{\beta}{2}$ -vel, a negatív irányba eltérítetteké $\sin^2 \frac{\beta}{2}$ -vel arányos.

Ez a kísérleti eredmény arra mutat, hogy a Stern-Gerlach berendezés a tengelyirányra (a mágneses mező leggyorsabb változási irányára) vetett spinvetületek szerint rendezi a neutronokat. Ha ugyanis ezt tételezzük fel, a kísérlet eredményei az előző

⁵¹A résznyalábok eltérülése kicsi, ezért a második Stern-Gerlach berendezés tengelye is az y irányra merőleges xz -síkban fog feküdni.

fejezet képleteiből azonnal következnek (feltéve, hogy a beeső nyaláb polarizálatlan). Ezt az interpretációt még azzal is lehet igazolni, hogy a neutronok Schrödinger-egyenletében figyelembe vesszük a mágneses tér hatását, vagyis a Hamilton-operátort kiegészítjük a $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}(\vec{r})$ taggal⁵², ami a dipólnyomaték és a mágneses mező kölcsönhatását veszi figyelembe. Az így kiegészített Schrödinger-egyenlet (*Pauli-egyenlet*) megoldása azt mutatja, hogy a hullámfüggvény valóban két z -irányban szeparált hullámra bomlik és a találati valószínűség a kísérletben tapasztalt arányban oszlik meg a résznyalábok között.

A következő fejezetben a hidrogénspektrum tárgyalásának rövid összefoglalását adjuk a Schrödinger egyenlet alapján. Ez a vázlatos ismertetés semmiképpen sem tükrözi a probléma és a Schrödinger által talált megoldás igazi jelentőségét.

3.56. A hidrogénatom

A hidrogénatom egy proton és egy elektron kötött rendszere. A hidrogénatom tárgyalása ekvivalens a Coulomb-problémával, amelyben az elektromos mező forrása az origó, és az origó körül keringő egyetlen részecske tömege a redukált tömeggel egyenlő. A proton és az elektron nagy tömegkülönbsége miatt azonban a redukált tömeg alig különbözik az elektrontömegtől és az alábbiakban nem is teszünk különbséget közöttük. A feladat matematikailag azonos a Kepler-problémával, amit a mechanikában részletesen tárgyaltunk.

A Hamilton-operátor a kinetikus energia és a potenciális energia operátorainak az összege. Koordinátareprezentációban a potenciális energia a

$$-\frac{e^2}{r}$$

Coulomb-potenciállal való szorzás, a kinetikus energia operátora pedig a 49.fejezet alapján

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \right] + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2.$$

Ennek alapján a Coulomb-probléma Schrödinger-egyenlete a következő:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} \right] + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2 \psi - \frac{e^2}{r} \psi = E \psi. \quad (125)$$

Láttuk (74. és 77.feladat), hogy centrális erőterben \hat{H} , \hat{L}^2 és \hat{L}_z egymással kommutáló operátorok. A centrális erőter nem tesz különbséget a spin két komponense

⁵²Ez a képlet az Elektrodinamika jegyzet (46) képletének mágneses megfelelője operátorosított alakban.

között (nem hat a spinre), ezért negyedikként az \hat{S}_z -t is besorolhatjuk a kommutáló operátorok közé.

Általános tételünk szerint ennek a négy operátornak van közös sajátfüggvényrendszere, amelyet annak alapján lehet kiválasztani, hogy tagjai a ϑ , φ változókat csak az $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ kombinációban tartalmazzák, és vagy a felső- vagy az alsó komponensük nulla (a z -irányú spinvetület a $\pm\hbar/2$ -k egyike). A \hat{H} -nak azt a sajátfüggvényét tehát, amely \hat{L}^2 -nek $\hbar^2 l(l+1)$ sajátértékhez, \hat{L}_z -nek $\hbar m$ sajátértékhez, \hat{S}_z -nek pedig — mondjuk — a $\hbar/2$ sajátértékhez tartozó sajátfüggvénye, a

$$\psi(r, \vartheta, \varphi, m_s) = R(r) \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \cdot \delta_{m_s, 1/2}$$

szorzatalakban kell keresnünk.

Írjuk ezt (125)-be. Ha felhasználjuk, hogy \hat{L}^2 nem hat $R(r)$ -re (49.fejezet), akkor könnyű látni, hogy az $Y_{lm} \cdot \delta_{m_s, 1/2}$ szorzattal lehet egyszerűsíteni. Ezután egyváltozós (közönséges) diff. egyenlet marad vissza az $R(r)$ ismeretlen függvényre és — természetesen — az E energiasajátértékre:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[R'' + \frac{2}{r} R' \right] + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R - \frac{e^2}{r} R = E \cdot R. \quad (126)$$

Tudjuk, hogy klasszikusan a korlátos mozgások negatív energiájúak, ezért — a 33.fejezet szerint — a normálható állapotoknak (ha vannak) negatív az energiájuk. Ezért a negatív energiájú sajátértékeket keressük.

Erdemes bevezetni $R(r)$ helyett a $\chi = r \cdot R(r)$ új ismeretlen függvényt, mert

$$R'' + \frac{2}{r} R' = \frac{1}{r} \chi''.$$

Ha ezt behelyettesítjük (126)-ba, a kapott egyenletet végigszorozzuk r -el és átrendezünk, a

$$\chi'' + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{me^2}{2\pi\hbar^2\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} \right] \chi = 0 \quad (127)$$

egyenletre jutunk. Az egyenletet a $0 \leq r < \infty$ tartományban kell megoldani a

$$\chi(0) = \chi(\infty) = 0 \quad (128)$$

határfeltételekkel. A χ origóbeli eltűnése az R végességének a következménye.

A számítás menetét nem részletezzük. Kiderül, hogy a határfeltételeket kielégítő megoldás csak az

$$E = E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{(n_r + l + 1)^2} \equiv -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

sajátenergiáknál létezik, amelyben $n_r = 0, 1, 2, \dots$. A 11.fejezetben a Bohr-Sommerfeld modellben ugyanezre a képletre jutottunk, de a zárójelen belüli 1-t „kézzel” kellett hozzáadnunk $(n_r + l)$ -hez. Erre most nincs szükség, mert automatikusan megjelenik. Ha

belegondolunk, hogy a Bohr-modell és a Schrödinger egyenlet szinte semmiben sem hasonlít egymásra, nem nagy túlzás a spektrumok egybeesését csodaszámba venni.

Ha spin nem volna, az E_n sajátérték elfajulása ugyanúgy n^2 -el volna egyenlő, mint a Bohr-Sommerfeld modellben. A spin miatt azonban a tényleges elfajulás ennek a duplája: $\nu_n = 2n^2$.

A (126) mutatja, hogy az $R(r)$ függvény E -től (azaz n -től) és l -től függ (az m -től és az m_s -től azonban nem), ezért az nml kvantumszámok, valamint a spinvetület által meghatározott sajátállapot hullámfüggvénye a következő:

$$\psi_{nlm \pm 1/2}(r, \vartheta, \varphi, m_s) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \cdot \delta_{m_s \pm 1/2}.$$

Az $n = 1, 2$ kvantumszámú *radiális hullámfüggvények* a következők:

$$\begin{aligned} R_{10}(r) &= \left(\frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot 2 \cdot e^{-\frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}r} \\ R_{20}(r) &= \left(\frac{me^2}{8\pi\epsilon_0\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \left(2 - \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2} \cdot r \right) e^{-\frac{me^2}{8\pi\epsilon_0\hbar^2}r} \\ R_{21}(r) &= \left(\frac{me^2}{8\pi\epsilon_0\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2} \cdot \sqrt{3} \cdot r \cdot e^{-\frac{me^2}{8\pi\epsilon_0\hbar^2}r}. \end{aligned}$$

92.Feladat: Analizáljuk az elektron találati valószínűségének az eloszlását az alapállapotban. Milyen sugárnál lesz a találati valószínűség maximális?

Megoldás: Az alapállapot kvantumszámai $n = 1$, $l = m = 0$, $m_s = \pm 1/2$ (kétszeresen elfajult a spinvetület szerint). Mivel $Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = konstans$, a találati valószínűség gömbszimmetrikus. A sugár mentén a találati valószínűség sűrűsége

$$w(r) = konst \cdot r^2 \cdot e^{-\frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2}r}$$

(az r^2 szorzó a $d\Omega$ térfogatelemből jön). Ennek a görbének az

$$r = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \equiv a_0$$

Bohr-sugárnál van maximuma. A 3.6 fejezet képleteiből kiolvashatjuk, hogy a Bohr-sugár a legbelső Bohr-pálya sugarával (r_1 -el) egyenlő. A kvantummechanikában csak ilyen halvány nyoma maradt a Bohr-pályáknak, annak ellenére, hogy az energiaspektrum a kvantummechanikában is ugyanaz, mint ami a Bohr-modellben volt.

Áttérünk utolsó témakörünkre, a pontrendszerek kvantummechanikájára. Itt találkozzunk a kvantumelmélet egyik legparadoxálisabb eredményével, a Bell-tétellel (vagy a mikrofizikai szeparálhatatlansággal), amely napjaink kvantumfizikai gondolkodásának egyik centrális témája, valamint az azonos részecskék különleges viselkedésével.

3.57. A pontrendszerek kvantummechanikája

Az eredetileg egyetlen szabadsági fokra megfogalmazott kvantummechanikát eddig kétszer terjesztettük ki a szabadsági fokok növelése irányában. Az

$$x \longrightarrow x, y, z \longrightarrow x, y, z, m_s$$

láncot most tovább bővítjük: ha a rendszerünk N tömegpontból áll, a szabadsági fokok száma $4N$ lesz, minden tömegponthoz be kell vezetni a maga x_i, y_i, z_i, m_{s_i} ($i = 1, 2, \dots, N$) szabadsági fokait. A spinnélküli ($s_i = 0$) tömegpontokat természetesen csak a Descartes-koordinátáikkal jellemezzük.

Mint már tapasztalhattuk, a kiterjesztés két alaplépésből áll:

1) A hullámfüggvények az *összes* szabadsági fok függvényei. Így pl. $N = 2$ -nél

$$\psi = \psi(x_1, y_1, z_1, m_{s_1}, x_2, y_2, z_2, m_{s_2}) \equiv \psi_{m_{s_1}m_{s_2}}(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2).$$

Ennek megfelelően módosul a skalárszorítás és a normálás képlete:

$$\begin{aligned} (\vec{\psi}, \vec{\phi}) &= \\ &= \sum_{m_{s_1}=-s_1}^{s_1} \sum_{m_{s_2}=-s_2}^{s_2} \int d\Omega_1 \cdot d\Omega_2 \cdot \psi_{m_{s_1}m_{s_2}}^*(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2) \phi_{m_{s_1}m_{s_2}}(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2). \end{aligned}$$

A Born-hipotézis szerint annak valószínűsége, hogy az 1.részecskét az x_1, y_1, z_1 pont körüli $d\Omega_1$ -ben $\hbar m_{s_1}$ spinvetülettel, a 2.részecskét az x_2, y_2, z_2 pont körüli $d\Omega_2$ -ben $\hbar m_{s_2}$ spinvetülettel észleljük,

$$w(x_1, y_1, z_1, m_{s_1}, x_2, y_2, z_2, m_{s_2}) \cdot d\Omega_1 \cdot d\Omega_2$$

-vel egyenlő, ahol

$$w(x_1, y_1, z_1, m_{s_1}, x_2, y_2, z_2, m_{s_2}) = |\psi_{m_{s_1}m_{s_2}}(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)|^2. \quad (129)$$

2) A koordináta- és az impulzusoperátorokat a Heisenberg-féle kanonikus felcserélési relációk határozzák meg: minden koordinátaoperátor a *saját* impulzusoperátorával $i\hbar$ -ra kommutál, az összes többi kommutátor pedig zérus. Ennek következtében a koordinátaoperátorok hatása megint szorzás, az impulzusoperátoroké pedig \hbar/i -szer parc. deriválás a megfelelő koordináta szerint.

A spinoperátorok minden részecskére ugyanolyan alakúak, mint amit egyetlen részecskénél találtunk. A különböző részecskék spinoperátorai függetlenek és kommutálnak egymással. Pl $s_1 = s_2 = 1/2$ -nél a $\sigma_{1x}\sigma_{2x}\psi$ négykomponensű mennyiség '11' komponense a következő:

$$(\sigma_{1x}\sigma_{2x}\psi)_{11} = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 (\sigma_{1x})_{1i} (\sigma_{2x})_{1j} \psi_{ij} = \psi_{22}.$$

Ez a példa mutatja, hogy az 1, 2, ... arab számokat két különböző értelemben használjuk: van 1. és 2. *részecske*, és mindkét részecske spinorjának van 1. és 2. *komponense*. Ez zavart okozhat, ezért a továbbiakban 1. és 2. részecske helyett *A* és *B* részecskéről fogunk beszélni. Egyelőre feltesszük, hogy ezek valamelyik paraméterük alapján megkülönböztethetők egymástól. Az előző képlet ebben a jelölésben ilyen:

$$(\sigma_{Ax}\sigma_{Bx}\psi)_{11} = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 (\sigma_{Ax})_{1i} (\sigma_{Bx})_{1j} \psi_{ij} = \psi_{22}.$$

A továbbiakban $N = 2$ -nél maradunk, az általánosítás tetszőleges N -re nyilvánvaló.

3.58. Független részecskék

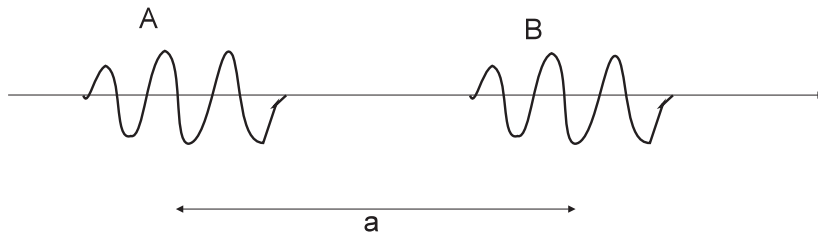
Két tömegpont (vagy két rendszer) függetlenségéről két különböző értelemben beszélhetünk:

1) *Kauzális függetlenség* azt értjük, hogy a két rendszer sem most, sem a múltban nem hatott kölcsön (nem érintkezett) egymással.

2) *Statisztikus függetlenség* azt értjük, hogy ha a két rendszer egy-egy fizikai mennyiséget (3.22 fejezet) megmérjük, az egyik mennyiség valószínűségi eloszlása független attól, hogy a másik mennyiséget mekkorának találjuk.

Feltesszük, hogy *a kauzális függetlenség maga után vonja a statisztikus függetlenséget*:

$$\text{kauzális függetlenség} \implies \text{statisztikus függetlenség}.$$



26. ábra.

Ez két dolgot jelent.

1) Ha a kauzális függetlenség fennáll, a statisztikus függetlenségnek is fenn kell állnia.

2) Ha a statisztikus függetlenség nem áll fenn, a kauzális függetlenség sem állhat fenn: kell valami *okának* lennie, hogy a két fizikai mennyiség összefügg egymással.

Az alábbiakban ha csak egyszerűen függetlenségről beszélünk, statisztikus függetlenségre gondolunk elsősorban: csak a statisztikus függetlenség az, ami a kísérleti szám adatok analízisével ellenőrizhető.

A független részecskékre vonatkozó *alaptétel* az, hogy *független részecskék hullámfüggvénye az egyes részecskék hullámfüggvényeinek a szorzata*:

$$\psi_{m_{sA}m_{sB}}(x_A, y_A, z_A, x_B, y_B, z_B) = \varphi_{m_{sA}}(x_A, y_A, z_A) \cdot \chi_{m_{sB}}(x_B, y_B, z_B). \quad (130)$$

A (129) szerint ugyanis ebben az esetben a találati valószínűség is szorzattá válik:

$$w(x_A, y_A, z_A, m_{sA}, x_B, y_B, z_B, m_{sB}) = |\varphi_{m_{sA}}(x_A, y_A, z_A)|^2 \cdot |\chi_{m_{sB}}(x_B, y_B, z_B)|^2,$$

és a valószínűségi számítás szerint a függetlenséget éppen az fejezi ki, hogy az események együttes bekövetkezési valószínűsége az egyes események valószínűségeinek a szorzatával egyenlő.

93. Feladat: Két részecske szabadon mozog az x -tengely pozitív irányában. Mindkettő hullámcsomag, távolságuk a . Írjuk fel a két-részecske rendszer hullámfüggvényét.

Megoldás: A rajz (26. ábra) azt sugallja, hogy a két hullámcsomag összegét kell képeznünk. Ne engedjünk a csábításnak! A helyes megoldás a szorzat:

$$\psi(x_A, x_B, t) = \psi(x_A, t) \cdot \psi(x_B - a, t),$$

amelyben $\psi(x, t)$ a hullámcsomag (70) hullámfüggvénye. ♣

94. Feladat: Két azonos tömegű, de különböző fajtájú tömegpont mozog az x -tengelyen. Egymásra nem hatnak (át is hatolhatnak egymáson), de mindkettőt rugóerő köti az origóhoz. Oldjuk meg a feladat Schrödinger-egyenletét.

Megoldás: A Hamilton-operátor az egyes részecskék Hamilton-operátorainak az összege:

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_A^2} + \frac{m\omega^2}{2} x_A^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_B^2} + \frac{m\omega^2}{2} x_B^2.$$

A magyarázat az, hogy a Hamilton-függvény az energiával egyenlő (a koordinátákon és az impulzusokon keresztül kifejezve). Két egymással nem kölcsönható tömegpont energiája az egyes részecskék energiáinak az *összege*. Operátorosítás után kapjuk a felírt Hamilton-operátort.

A \hat{H}_A csak az A-részecskére, a \hat{H}_B csak a B-részecskére hat, ezért az összegük a következő módon hat egy szorzathullámfüggvényre:

$$\hat{H}\varphi(x_A) \cdot \chi(x_B) = (\hat{H}_A\varphi(x_A)) \cdot \chi(x_B) + \varphi(x_A) \cdot (\hat{H}_B\chi(x_B)).$$

Innen már elég könnyű kitalálni, hogy az $\varphi(x_A)$ -t és az $\chi(x_B)$ -t a harmónikus oszcillátor egy-egy sajátfüggvényének kell választani:

$$\varphi(x_A) = e_{n_1}(x_A) \quad \chi(x_B) = e_{n_2}(x_B).$$

Az előző képletben ekkor

$$\begin{aligned} \hat{H}_A\varphi(x_A) &\longrightarrow \hat{H}_A e_{n_1}(x_A) = \hbar\omega \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) e_{n_1}(x_A) \\ \hat{H}_B\chi(x_B) &\longrightarrow \hat{H}_B e_{n_2}(x_B) = \hbar\omega \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) e_{n_2}(x_B), \end{aligned}$$

ezért

$$\hat{H}e_{n_1}(x_A) \cdot e_{n_2}(x_B) = \hbar\omega(n_1 + n_2 + 1)e_{n_1}(x_A)e_{n_2}(x_B).$$

Az $e_{n_1}(x_A)e_{n_2}(x_B)$ szorzat tehát az $E_{n_1n_2} = E_{n_1} + E_{n_2} = \hbar\omega(n_1 + n_2 + 1)$ sajátértékhez tartozó sajátfüggvény. Ez az eredmény összhangban van azzal, hogy független részecskék hullámfüggvénye szorzatalakú. Könnyű látni, hogy ennek a sajátértéknek az elfajultsága $\nu_{n_1n_2} = n_1 + n_2 + 1$. ♣

3.59. Korrelált részecskék

Ha a hullámfüggvény nem szorzatalakú, akkor a részecskék statisztikusan nem függetlenek egymástól: *korreláció* van közöttük.

A korrelált hullámfüggvény legegyszerűbb esete két különböző szorzatfüggvény szuperpozíciója.

Tegyük fel az egyszerűség kedvéért, hogy a részecskéknek csak egyetlen szabadsági foka van, az x koordináta.

Legyen U és V az x -tengely két távoli szakasza (ld. a 27.ábrát). Mindkettőt két részre bontjuk: $U = U_- + U_+$, $V = V_- + V_+$.

Legyen $\varphi_+(x)$ olyan hullámfüggvény, amely csak V_+ -ban, $\varphi_-(x)$ pedig olyan, amely csak V_- -ban különbözik zérustól és hasonlóan definiáljuk U_{\pm} -hoz viszonyítva a $\chi_{\pm}(x)$ hullámfüggvényeket. Legyen mind a négy hullámfüggvény 1-re normált.

A $\varphi_+(x_A)\chi_+(x_B)$ hullámfüggvény szorzat és azt írja le, hogy az A részecske valahol V_+ -ban, a B részecske valahol U_+ -ban van és a találati valószínűségük teljesen független egymástól.

Hasonló jelentése van a $\varphi_-(x_A)\chi_-(x_B)$ szorzatnak.

Képezzük most ezek

$$\psi(x_A, x_B) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_+(x_A)\chi_+(x_B) + \varphi_-(x_A)\chi_-(x_B)) \quad (131)$$

lineárkombinációját. Ez már korrelált hullámfüggvény. Vizsgáljuk meg, milyen természetű az a korreláció, amit leír.



27. ábra.

Mindenekelőtt megjegyezzük, hogy — mint könnyen ellenőrizhető —, az $1/\sqrt{2}$ faktor következtében ψ 1-re normált. A bizonyításhoz az egyes tényezők normáltságát kell felhasználni, valamint azt, hogy $\varphi_+\varphi_- = \chi_+\chi_- = 0$.

Annak $W(++)$ valószínűsége, hogy az A -t V_+ -ban, a B -t U_+ -ban találjuk, a Born-hipotézis szerint

$$W(++)=\int_{V_+} dx_A \int_{U_+} dx_B \cdot |\psi(x_A, x_B)|^2 = \frac{1}{2}$$

-el egyenlő (az integrál kiszámításához φ_{\pm} és χ_{\pm} normáltságát használtuk, és azt, hogy az integrációs tartományban $\varphi_- = \chi_- = 0$).

Hasonlóan kapjuk annak valószínűségét, hogy az A -t V_- -ban, a B -t U_- -ban észleljük:

$$W(--)=\int_{V_-} dx_A \int_{U_-} dx_B \cdot |\psi(x_A, x_B)|^2 = \frac{1}{2}.$$

A maradék két valószínűség zérus:

$$W(+)=\int_{V_+} dx_A \int_{U_-} dx_B \cdot |\psi(x_A, x_B)|^2 = 0,$$

$$W(-)=\int_{V_-} dx_A \int_{U_+} dx_B \cdot |\psi(x_A, x_B)|^2 = 0.$$

Ezek a valószínűségek mutatják, hogy a két részecske nem független egymástól.

Legyen $W_A(\pm)$ annak valószínűsége, hogy ha csak az A részecskét figyeljük meg, V_{\pm} -ben találjuk. Hasonló módon definiáljuk a B részecske $W_B(\pm)$ találati valószínűségeit az U_{\pm} -re vonatkozóan. Az a két lehetőség, hogy a részecskét az egyik vagy a másik

térrészben *figyeljük meg*, kizárja egymást, ezért a megfelelő valószínűségek összeadódnak:

$$\begin{aligned}W_A(+) &= W(+-) + W(++)= \frac{1}{2} \\W_A(-) &= W(--)+ W(-+)= \frac{1}{2} \\W_B(+) &= W(-+)+ W(++)= \frac{1}{2} \\W_B(-) &= W(+-) + W(--)= \frac{1}{2}.\end{aligned}$$

Látható, hogy pl. $W(++)=1/2 \neq W_A(+)\cdot W_B(+)=1/4$, ez bizonyítja a függetlenség hiányát.

A korreláció még világosabban látszik, ha a feltételes valószínűséget használjuk. Legyen $W(+|\pm)$ annak valószínűsége, hogy A -t V_+ -ban találjuk *feltéve*, hogy a B -t U_{\pm} -ban észleltük. Nyilvánvaló, hogy $W(+|+)=1$, míg $W(+|-)=0$, tehát az A találati valószínűsége *függ* attól, hogy hol van B .

Ennek a korrelációnak fontos következményei vannak.

Képzeljünk el két kísérletezőt, Ubult és Vendelt, akik közül az első az U , a második a V tartományban tud megfigyelést végezni (ezek mellett tartózkodnak). Legyenek egymástól jó messze.

Álljon rendelkezésükre az A , B részecske (131) hullámfüggvényű tiszta állapotú anszamlja.

Az anszaml valamelyik eleméhez tartozó A részecske helyét megmérve Vendel megállapítja, hogy V melyik részében van. Ezt megtelefonálja Ubulnak. Ezután Ubul megfigyeli, hogy az U melyik részében van a B részecske. Ezt az eljárást sokszor megismétlik az anszaml különböző elemein.

Ha feltesszük, hogy minden a kvantummechanika szabályai szerint történik, a mérések eredménye a következőkben foglalható össze:

1) Vendel kb. ugyanannyiszor találja A -t V_+ -ban mint V_- -ban, Ubul kb. ugyanannyiszor találja B -t U_+ -ban mint U_- -ban.

2) Valahányszor Vendel azt telefonálja Ubulnak, hogy A -t V_+ -ban találta, Ubul U_+ -ban fogja találni B -t és ugyanez mondható el V_- -ről és U_- -ről. Ezalól a szabály alól egyetlen kivétel sincs.

A második tulajdonság fejezi ki a szoros függést A és B között. A jelenség elég megdöbbentő: arra mutat, hogy *az A -n elvégzett megfigyelés mintha közvetlenül hatna a tetszőlegesen távoli B részecske állapotára*, ami kérdésessé teszi fizikai világképünk egyik pillérét, a közelhatás elvét (Elektrodinamika jegyzet 1.fejezet).

Elképzelhető azonban egy kiút.

Megállapítottuk, hogy ha nincs statisztikus függetlenség, akkor a kauzális függetlenség sem állhat fenn: a részeknek vagy most kell hatniuk egymásra, vagy a múltban hatottak egymásra. A (131) hullámfüggvény szerkezete olyan, hogy a két részecske *most* nem hat egymásra, mert nagyon távol vannak egymástól. De akkor a múltban

valamikor találkozniuk *kell*t. Röviden: a (131) alakú hullámfüggvény nem realizálható másképp, mint a részecskék múltbeli kölcsönhatása révén.

De akkor nem zárható ki, hogy már a részecskék *szétválásakor* valamilyen módon eldőlt, hogy az anszaml minden olyan elemében, amelyben az A most a V_+ -ban **van**, a B mindig pont az U_+ -ban **van**, amelyben pedig az A most a V_- -ban **van**, a B mindig pont az U_- -ban **van**.

Ha valóban ez a helyzet, akkor Vendel nyilván nem gyakorol semmiféle hatást a távoli B -re. Csupán az történik, hogy *napvilágra kerül* az a korreláció, amely már a mérés előtt is ott **van** az anszaml elemeiben.

Ezt a fajta korrelációt *közös ok* típusúnak nevezzük. Lépten nyomon találkozunk vele. Amikor pl. Pécsre érkeve a standokon ugyanolyan újságokat látok, mint a Déli pályaudvaron, egyáltalán nem lepődök meg: ez nem a pesti standok hatását bizonyítja a pécsiekre, hanem a nyomdagépnek, mint közös oknak a hatása *mindkettőre*.

A fenti magyarázatban a **van** szót mindenütt kiemeltük. Az interferométerrel kapcsolatban láttuk (47.fejezet), hogy a mikrojelenségek analízisének a léteivel csinálni kell bánni. A közös okra visszavezető magyarázat *lehet* jó, de nem bizonyos, hogy az. Nem lehet eleve kizárni, hogy csak a ténylegesen *megfigyelt* részecskék vannak határozottan az egyik vagy a másik térrészben, de amíg nem figyeljük meg őket, nem választanak a térrészek között. Ha tényleg ez a helyzet, akkor mégiscsak van valamilyen befolyása az A -n elvégzett mérésnek a távoli B állapotára.

A *Bell-tétel* (1964) azt mondja ki, hogy a *kvantumfizikai korrelációk általában nem vezethetők vissza közös okra*. Ha a hullámfüggvény nem szorzat, a rendszer egyik részén elvégzett megfigyelés *befolyásolhatja* a tetszőlegesen távoli többi rész állapotát. Úgy is lehet mondani, hogy a részeket a nagy távolság látszólag szeparálja egymástól, a „valóságban” mégis marad valamilyen furcsa kapcsolat közöttük: ha a részek a múltban valamikor kölcsönhatottak, később a belső dinamikájuk következtében már soha többé nem válhatnak függetlenné egymástól (a kvantumfizikai *szeparálhatatlanság* elve).

Érdekes, hogy noha Vendel A -n végzett mérése a Bell-tétel szerint *befolyásolja* az U bulhoz közeli B állapotát, Vendel ezt nem használhatja fel arra, hogy üzenetet küldjön U bulnak. Ugyanis *nem Vendeltől függ*, hogy a V melyik részében találja meg A -t. Ha tőle függne, akkor Morse jeleknek használva, hogy U bul U_+ -ban vagy U_- -ban találja B -t, üzenhetne U bulnak, még hozzá alighanem fényfeletti sebességgel. Erre azonban nincs lehetőség, ezért a Bell-tétel — úgy látszik — nem mond ellent a relativitáselméletnek.

3.60. Spinkorrelációs kísérletek

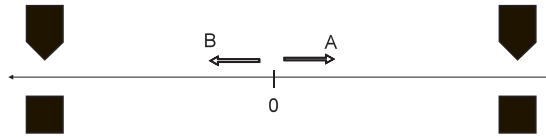
A Bell-tétel bizonyításához elég egyetlen konkrét esetben megmutatni, hogy a kvantummechanikai korrelációk nem lehetnek közös ok típusúak. Bell erre a célra két feles spinű részecskét választott, amelyek az origóból indulva ellentétes irányban repülnek

szét és a hullámfüggvényük spinfüggő része

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(w_{A+}w_{B-} - w_{A-}w_{B+}) \quad (132)$$

alakú. Az ilyen részecskepárok tiszta állapotú anszamlja kísérletileg jól megvalósítható és pontos mérésekkel igazolható, hogy a kvantummechanika által megkövetelt korrelációk valóban teljesülnek.

Vizsgáljuk meg ezeket a korrelációkat.



28. ábra.

Tegyük fel, hogy az A részecske pozitív y -irányban, a B negatív y -irányban mozog. Az y tengely pozitív oldalán, az origótól messze U -ban egy \vec{n} irányban orientált Stern-Gerlach berendezésen bocsátja át az egymás után jövő A részecskéket és megállapítja, hogy $+\vec{n}$ vagy $-\vec{n}$ irányban térülnek el. Sok mérés alapján kiszámíthatja a $\pm\vec{n}$ irányú eltérés valószínűségét. Az y tengely negatív oldalán, az origótól ugyancsak távol V -ben hasonlóan kísérletezhet a B részecskével.

Mit tapasztalnak?

Ha Stern-Gerlach mágneseket mindkettőn $+z$ irányban orientálják, akkor a (131) hullámfüggvénnyel szerzett tapasztalataink alapján számítás nélkül is láthatjuk, hogy minden egyes A, B párnál ellentétes előjelű spinvetületet mérnek: amikor A pozitív irányban térül el, B eltérése negatív és viszont (teljes antikorrreláció⁵³). Ezen belül mindkét részecske $1/2$ valószínűséggel térül el az egyik vagy a másik irányban.

(Ha mégis számítani akarjuk a valószínűségeket, (59)-t kell használnunk. Az ellentétes irányú eltérések valószínűsége

$$|(w_{A+}w_{B-}, \psi)|^2 = |(w_{A-}w_{B+}, \psi)|^2 = 1/2,$$

az azonos irányúaké

$$|(w_{A+}w_{B+}, \psi)|^2 = |(w_{A-}w_{B-}, \psi)|^2 = 0.)$$

Érdekes, hogy ha a z -irány helyett a mágnesek tetszőleges (y -ra merőleges⁵⁴) \vec{n} irányba vannak orientálva, az eredmény ugyanaz: minden \vec{n} -nél ugyanolyan teljes antikorrrelációt kapunk. Ennek az az oka, hogy a ψ nem változik meg, ha benne a w_{\pm}

⁵³Teljes korrelációnál az eseménypár egyik tagja egyértelműen meghatározza a másikat. Ebben az értelemben a z -irányú spinvetületek között a korreláció teljes. Az „anti” jelző csupán arra utal, hogy a teljes korrelációban lévő események az előjel szempontjából ellentétesek.

⁵⁴Ez a feltétel valójában szükségtelen, de a képleteket egyszerűsíti.

spinorokat az 54.fejezet végén bevezetett $\psi_{\pm n}$ spinorokkal helyettesítjük:

$$w_+ \longrightarrow \psi_n = \overset{((122))}{=} \cos \frac{\beta}{2} \cdot w_+ + \sin \frac{\beta}{2} \cdot w_- \quad (133)$$

$$w_- \longrightarrow \psi_{-n} = \overset{((123))}{=} -\sin \frac{\beta}{2} \cdot w_+ + \cos \frac{\beta}{2} \cdot w_-. \quad (134)$$

Valóban, ennél a helyettesítésnél

$$\begin{aligned} \psi &\longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{A_n}\psi_{B_{-n}} - \psi_{A_{-n}}\psi_{B_n}) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\cos \frac{\beta}{2} \cdot w_{A_+} + \sin \frac{\beta}{2} \cdot w_{A_-} \right) \cdot \left(-\sin \frac{\beta}{2} \cdot w_{B_+} + \cos \frac{\beta}{2} \cdot w_{B_-} \right) - \\ &- \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\sin \frac{\beta}{2} \cdot w_{A_+} + \cos \frac{\beta}{2} \cdot w_{A_-} \right) \cdot \left(\cos \frac{\beta}{2} \cdot w_{B_+} + \sin \frac{\beta}{2} \cdot w_{B_-} \right) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(w_{A_+}w_{B_-} - w_{A_-}w_{B_+}) = \psi. \end{aligned}$$

A ψ -nek ezt a tulajdonságát úgy is kifejezhetjük, hogy — a látszat ellenére — a z -tengely iránya nincs benne kitüntetve.

Legyen most az A -t mérő mágnes a $+z$ -irányban, a B -t mérő pedig (a z -tengellyel β szöveget bezáró) \vec{n} irányban orientált, és jelöljük $W_{++}(\beta)$ -val annak valószínűségét, hogy mindkét spinvetületet pozitívnek találjuk.

Ezt a valószínűséget is megkaphatjuk számolás nélkül. Ha ugyanis az A vetülete $+\hbar/2$ (ennek valószínűsége $1/2$), akkor a teljes antikorreláció miatt a B $-z$ -irányú vetülete is $+\hbar/2$. Az \vec{n} a $-z$ -iránnyal $\pi - \beta$ szöveget zár be, ezért annak valószínűsége, hogy \vec{n} -vetületét pozitívnek találjuk, $\cos^2 \frac{\pi - \beta}{2} = \sin^2 \frac{\beta}{2}$ -vel egyenlő. Így

$$W_{++}(\beta) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\beta}{2} = \frac{1}{4}(1 - \cos \beta). \quad (135)$$

(Ha a formális számítást részesítjük előnyben, akkor a

$$W_{++}(\beta) = |(w_{A_+}\psi_{B_n}, \psi)|^2$$

képletből kell kiindulni. Mivel $(w_+, w_+) = 1$, $(w_+, w_-) = 0$, ezért

$$W_{++}(\beta) = \frac{1}{2}|(w_{A_+}\psi_{B_n}, w_{A_+}w_{B_-})|^2 = \frac{1}{2}|(\psi_{B_n}, w_{B_-})|^2 = (133) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\beta}{2}.)$$

A (135) összhangban van a teljes antikorrelációval, ui. $W_{++}(0) = 0$, $W_{++}(\pi) = 1/2$.

Hasonló módon kaphatjuk meg a

$$W_{--}(\beta) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\beta}{2} \quad W_{+-}(\beta) = W_{-+}(\beta) = \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\beta}{2}$$

valószínűségeket is.

Mivel a z -tengely iránya ψ -ben nincs kitüntetve, ezek a képletek akkor is érvényesek, amikor az A spinvetületét valamilyen \vec{n}_1 irányra, a B -ét pedig egy \vec{n}_2 irányra mérjük, amely az \vec{n}_1 -el β szöveget zár be (és mindkettő merőleges az y -tengelyre).

Ezzel befejeztük a ψ által meghatározott spinkorrelációk áttekintését. Megismételjük, hogy a kísérletek igazolják a kvantumelmélet alapján számítható valószínűségeket.

Áttérünk annak a kérdésnek a vizsgálatára, hogy visszavezethetők-e ezek a korrelációk közös okra.

Ha mindkét kísérletező azonos irányú spinvetületet mér, a helyzet hasonló ahhoz, amit az előző fejezetben találtunk:

1) Uból a pozitív y -tengelyen méri az A , Vendel a negatív y -tengelyen méri a B \vec{n} -irányú spinvetületét. Mindkettő fele-fele arányban észleli a $\pm\hbar/2$ vetületet.

2) Valahányszor Vendel azt telefonálja Ubulnak, hogy $+\hbar/2$ -t észlelt, Uból bizonyosan $-\hbar/2$ -t fog találni. Ezalól a szabály alól nincs kivétel.

Most megfogalmazzuk matematikailag kezelhető formában azt a *feltevést*, hogy ez a korreláció közös ok típusú.

A spinkorreláció csak abban az esetben lehet közös ok típusú, ha léteznek olyan *rejtett paraméterek*⁵⁵ — szemléletesebb kifejezéssel: „gének” —, amelyek egyértelműen meghatározzák a rajtuk elvégezhető kísérletek kimenetelét (a „fenotípust”). Így minden \vec{n} térbeli irányhoz tartoznia kell egy g_n és egy \bar{g}_n génnek. Ha a részecske a g_n -t tartalmazza, akkor az \vec{n} -irányú spinvetületét mérve $+\hbar/2$ -t kapunk, míg a \bar{g}_n gén $-\hbar/2$ vetületet eredményez.

Ez a kép a spinkorrelációkat azért vezeti vissza közös okra, mert az A és a B részecske „génkészlete” a szétválásukkor véglegesen kialakul. A teljes antikorrrelációhoz csupán azt kell feltételezni, hogy minden adott \vec{n} -nél az egyik részecske g_n génnel, a másik \bar{g}_n génnel rendelkezik. Ha ez valóban így van, akkor Vendel a B részecske \vec{n} -irányú spinvetületének a megméréseivel egyáltalán nem gyakorol hatást a távoli A részecskére. Csak annyi történik, hogy *kiderül*, a pár melyik részecskéje tartalmazza a g_n -gént, melyik a \bar{g}_n -t. Ha pl. Vendel $+\hbar/2$ -t talál, akkor már biztos, hogy a másik részecskében \bar{g}_n gén *van*, — ehhez nincs szükség semmiféle távolhatásra.

Vegyük észre, hogy ehhez a magyarázathoz nem szükséges ismernünk a rejtett paraméterek tényleges fizikai természetét, és azt a módot sem, ahogy hatnak. A genetikában is lehet a génekhez kapcsolódó tulajdonságokat tartalmasan vizsgálni anélkül, hogy ismernénk a gének molekuláris struktúráját és hatásmechanizmusát. Ami egyedül fontos, az a gének (rejtett paraméterek) *léte* és fenotípust meghatározó szerepe.

Éppen ezért a rejtett paraméterekkel szemben nem érv az, hogy „senki sem látja őket” a maguk fizikai mivoltában, és senkinek sincs konkrét elképzelése arról, milyen módon fejtik ki a hatásukat. A hipotézis csak azon az alapon cáfolható, hogy a

⁵⁵Helyesebb lenne rejtett szabadsági fokoknak nevezni őket, de a paraméter elnevezés az elfogadott.

ténylegesen elvégezhető kísérletek különféle kimeneteleihez (a „fenotípusokhoz”) nem a tapasztalati megfigyelt valószínűségeket rendeli hozzá. Ezt fogjuk megmutatni a spin-korrelációk esetében.

Az ellentmondás kiderítéséhez elegendő három különböző $\vec{n}_1, \vec{n}_2, \vec{n}_3$ térbeli irányra és ennek megfelelően a hat $g_1, \bar{g}_1, g_2, \bar{g}_2, g_3, \bar{g}_3$ géntípusra korlátozódni. Ekkor a géntartalom szempontjából nyolc ($= 2^3$) különböző A, B pár képzelhető el, amelyeket a táblázatban soroltunk fel.

A pár típusa	Az A génjei	A B génjei
a	$g_1 g_2 g_3$	$\bar{g}_1 \bar{g}_2 \bar{g}_3$
b	$g_1 g_2 \bar{g}_3$	$\bar{g}_1 \bar{g}_2 g_3$
c	$g_1 \bar{g}_2 \bar{g}_3$	$\bar{g}_1 g_2 g_3$
d	$g_1 \bar{g}_2 g_3$	$\bar{g}_1 g_2 \bar{g}_3$
\bar{a}	$\bar{g}_1 \bar{g}_2 \bar{g}_3$	$g_1 g_2 g_3$
\bar{b}	$\bar{g}_1 \bar{g}_2 g_3$	$g_1 g_2 \bar{g}_3$
\bar{c}	$\bar{g}_1 g_2 g_3$	$g_1 \bar{g}_2 \bar{g}_3$
\bar{d}	$\bar{g}_1 g_2 \bar{g}_3$	$g_1 \bar{g}_2 g_3$

A táblázat két fele egymás „felülhúzottja” (ha \bar{g} -n magát a g -t értjük).

A ψ -állapotú tiszta anszambllban a nyolc különböző lehetőség ismeretlen valószínűséggel fordul elő. Jelöljük ezeket a valószínűségeket p_α -val ($\alpha = a, b, c, d, \bar{a}, \bar{b}, \bar{c}, \bar{d}$). Maga a teljes antikorreláció ténye ezekről a valószínűségekről nem mond semmit, mert mind a nyolc típussal összefér. Ezért olyan mérések valószínűségeit is be kell vonni a vizsgálatba, amelyekben a két részecske különböző irányú spinvetületét határozzuk meg.

Jelöljük p_{ij} -vel ($i, j = 1, 2, 3$) annak valószínűségét, hogy amikor az A részecske \vec{n}_i irányú és a B részecske \vec{n}_j irányú spinvetületét mérjük mindkettőt pozitívnak találjuk.

Ha az A \vec{n}_1 irányú és a B \vec{n}_2 irányú spinvetületét mérjük, a táblázat szerint csak a c és a d típusú párok adhatnak mindkettőre pozitív vetületet. Ezért

$$p_{12} = p_c + p_d.$$

Hasonlóan láthatjuk azt is, hogy

$$p_{23} = p_b + p_{\bar{d}}$$

$$p_{13} = p_b + p_c.$$

Ebből következik, hogy

$$p_{12} + p_{23} - p_{13} = p_d + p_{\bar{d}}. \quad (136)$$

A p_{12}, p_{23}, p_{13} ismeretében tehát meghatározhatjuk annak $p_d + p_{\bar{d}}$ valószínűségét, hogy az A, B pár *egyikében* $g_1 \bar{g}_2 g_3$, *másikában* $\bar{g}_1 g_2 \bar{g}_3$ legyen a génösszetétel.

A p_{12} , p_{23} , p_{13} értékét a kvantumelmélet (és a tapasztalat) szerint (135) határozza meg. Eszerint

$$p_{12} = \frac{1}{4}(1 - \cos \beta_{12}) \quad p_{23} = \frac{1}{4}(1 - \cos \beta_{23}) \quad p_{32} = \frac{1}{4}(1 - \cos \beta_{13}), \quad (137)$$

ahol β_{ij} az \vec{n}_i és a \vec{n}_j által bezárt szög.

Ha ezeket a kifejezéseket beírjuk (136)-ba, a

$$p_d + p_{\bar{d}} = \frac{1}{4}(1 - \cos \beta_{12} - \cos \beta_{23} + \cos \beta_{13})$$

képletre jutunk.

Ha a „gének” (rejtett paraméterek) valóban léteznek és a feltételezett módon hatnak, akkor a $p_d + p_{\bar{d}}$ összeg — a valószínűség fogalma alapján, — nem lehet negatív szám. Nem nehéz azonban olyan irányokat találni, amelyek mellett ez a képlet a $p_d + p_{\bar{d}}$ valószínűségekre negatív értéket ad. Legyen például

$$\beta_{12} = \frac{\pi}{4} \quad \beta_{23} = \frac{\pi}{2} \quad \beta_{13} = \beta_{12} + \beta_{23} = \frac{3\pi}{4}.$$

Akkor

$$\cos \beta_{12} = -\cos \beta_{13} = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad \cos \beta_{23} = 0,$$

és

$$p_d + p_{\bar{d}} = \frac{1}{4}(1 - \sqrt{2}) < 0.$$

A teljes antikorrreláció rejtett paramétereken alapuló felfogása tehát nem fér össze a kvantumelméletből számítható valószínűségekkel és azok tapasztalati értékeivel, ezért a kvantumfizikai korrelációk *általában* nem vezethetők vissza közös okra. A Bell-tételt ezzel igazoltuk.

Amikor Vendel megméri a — mondjuk — z -irányú spinvetületet, ezután már biztosan tudja, hogy hogy Ubul milyen előjelű vetületet fog mérni: a mérés eredményét nyugodtan előre be is jelentheti telefonon Ubulnak. Beláttuk, hogy ez nem értelmezhető úgy, hogy egyszerűen felismer egy olyan tulajdonságot, amely a szétválásuk óta kódolva van a részecskékben. De akkor el kell fogadnunk, hogy a vetület, mint tulajdonság, a mérés hatása alatt jön létre. Ez nem volna új probléma, ha csak arra a részecskére vonatkozna, *amelyiken* Vendel a mérést elvégezte. A mérési posztulátumok tárgyalásánál ugyanis láttuk, hogy a mérés „beugrasztja” a mérés tárgyát képező objektumot a mért mennyiség operátorának valamelyik sajátállapotába.

A minőségileg új elem az, hogy a rendszer egyik részén (az A -n) végzett mérés egyidejűleg a tetszőlegesen távoli másik rész (a B) „beugrását” is előidézi. Amikor például az A spinvetületét pozitívnak találjuk, bekövetkezik a

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(w_{A+}w_{B-} - w_{A-}w_{B-}) \implies w_{A+}w_{B-}$$

hullámfüggvény redukció, ami a B részecske állapotát is határozottá teszi.

A jelenséget mégsem nevezhetjük nyugodt lélekkel távolhatásnak. A „hatás” szavunk ugyanis magába foglalja azt a jelentést, hogy a hatás révén akaratlagos befolyást gyakorolhatunk arra az objektumra, amelyre a hatás irányul. A kvantumkorrelációknál azonban erről nincs szó. Vendel egyedül a mérés időpontját választhatja szabadon, a mérés aktuális eredményét nem. *Ha nem telefonálna Ubulnak, Ubul sohase jönne rá magától, hogy Vendel egyáltalán végzett-e vetületmérést.* Milyen „hatás” az, amiről csak abból szerezhetünk tudomást, hogy figyelmeztetnek rá?

Az előző fejezetben ezt úgy fejeztük ki, hogy a kvantumkorrelációk nem alkalmasak üzenetküldésre, és ez megnyugtató a relativitáselmélet érvényessége szempontjából. Ami miatt jogos zavart érzünk, az az, hogy a jelenségre nincs szavunk (fogalmunk): azt se mondhatjuk teljes joggal, hogy az A -n végzett mérés nincs hatással B -re, de azt sem, hogy hatással van rá. A kvantummechanika nem szűnik meg figyelmeztetni arra, hogy fogalomkészletünknek korlátai vannak. Most már azt is látjuk, hogy a korlátok makroszkópikus méretekben lefolyó jelenségeknél is felbukkanhatnak.

3.61. Fermionok és bozonok

Vezessünk be két fogalmat, a részecskék hasonlóságát és azonosságát.

Két részecskét akkor mondunk *hasonlóknak*, ha bizonyos paramétereikben különböznek ugyan egymástól, de olyan kis mértékben, hogy praktikusán nem tudunk különbséget tenni közöttük.

Két részecskét akkor nevezünk *azonosnak*, ha minden paraméterük pontosan megegyezik egymással.

Két makroszkópikus test sohasem lehet azonos egymással, mert a makroszkópikus testeknek végtelen sok paramétere van. A mikrorészecskék azonossága azért tartalmaz fogalom, mert a paraméterek száma, ami jellemzi őket, véges, az elemi részecskék esetében kifejezetten kis szám. Az elektronnak például nincs más jellemző paramétere, mint a tömege, a töltése és a mágneses dipólnyomatéka⁵⁶.

A kvantummechanika szerint a hasonló és az azonos részecskék viselkedése között minőségi különbség van.

Legyen A és B két *hasonló* részecske, amelyek *nem hatnak egymásra* és — az egyszerűség kedvéért — az x -tengely mentén mozognak (és képesek akadálytalanul áthatolni egymáson). Végezzük el velük a következő gondolatkísérletet:

⁵⁶A paramétereikről és a fizikai mennyiségeikről ld. a 22.fejezetet.

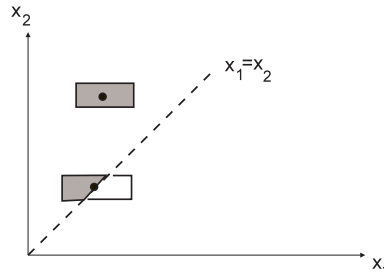


29. ábra.

A $t < 0$ -ban legyenek bezárva egy-egy végtelen potenciálgödörbe, amelyek a U és a V szakaszt foglalják el. A hullámfüggvényük:

$$\psi(x_A, x_B, t) = \varphi(x_A, t) \cdot \chi(x_B, t). \quad (138)$$

Amíg $t < 0$, a φ csak a V -ben, a χ csak az U -ban különbözik zérustól.



30. ábra.

Tegyük most fel, hogy a $t = 0$ pillanatban a potenciálfalak hirtelen „leomlanak” és a részecskék szabadabbá válnak. Mivel nem hatnak egymásra, a hullámfüggvényük továbbra is a (138) szorzat, amelyben $\varphi(x_A, t)$ és $\chi(x_B, t)$ a szabad A és B részecskét leíró időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldásai olyan kezdőfeltétel mellett, hogy $t = 0$ -ban a φ a V , a χ az U tartományra lokalizált. Pozitív időkre azonban ezek a hullámfüggvények már az x -tengely minden pontjában különbözni fognak zérustól.

Annak valószínűségi sűrűsége, hogy valamilyen pozitív időpillanatban az A -t az x_1 pontban, a B -t az x_2 pontban találjuk, természetesen $|\psi(x_1, x_2, t)|^2$ -el egyenlő.

A részecskék hasonlósága miatt azonban ezt a valószínűséget nincs módunkban kísérletileg vizsgálni, mert csak azt tudjuk megállapítani, hogy az *egyik* részecske x_1 -ben, a *másik* x_2 -ben van — de, hogy melyik az egyik és melyik a másik, azt nem tudjuk eldönteni.

A kísérletileg ellenőrizhető valószínűség tehát annak

$$p(x_1, x_2, t) = |\psi(x_1, x_2, t)|^2 + |\psi(x_2, x_1, t)|^2 \quad (139)$$

valószínűségi sűrűsége, hogy az egyik részecskét x_1 -ben, a másikat x_2 -ben találjuk. Ez a valószínűségi sűrűség szimmetrikus függvény: $p(x_1, x_2, t) = p(x_2, x_1, t)$ és a nor-

málási feltételében minden x_1, x_2 párt csak egyszer kell számításba venni:

$$\int_{x_1 \leq x_2} dx_1 \cdot dx_2 \cdot p(x_1, x_2, t) = 1.$$

Amikor $x_1 \neq x_2$, akkor annak valószínűsége, hogy az egyik részecskét az $(x_1, x_1 + dx_1)$, a másikat az $(x_2, x_2 + dx_2)$ intervallumban észleljük, $p(x_1, x_2, t) \cdot dx_1 dx_2$ -vel egyenlő. Amikor azonban $x_1 = x_2$, ezt a kifejezést még meg kell szorozni 1/2-el. Az ok az, hogy a dx_1, dx_2 oldalú téglalap az első esetben teljes egészében belül van az $x_1 \leq x_2$ tartományban, a második esetben azonban csak félig (ld. a 30. ábrát)

Gondolatkísérletünkben a hullámfüggvényt a (138) képlet adja meg, ezért a találati valószínűség sűrűsége a következő:

$$p(x_1, x_2, t) = |\varphi(x_1, t)|^2 \cdot |\chi(x_2, t)|^2 + |\varphi(x_2, t)|^2 \cdot |\chi(x_1, t)|^2. \quad (140)$$

Azt gondolhatnánk, hogy ha gondolatkísérletünket *azonos* részecskékkel végeznénk el, a valószínűsége ugyanezt a (140) képletet kapnánk. Igaz, a $t < 0$ kiindulási helyzetben, amikor a részecskék külön-külön be vannak zárva a saját gödreikbe, nem mondhatnánk, hogy az *A típusú részecske* van a *V*-ben, és a *B típusú részecske* van az *U*-ban, hiszen a részecskék azonosak. De semmi sem akadályoz meg abban, hogy a *V*-be bezárt részecskét *elnevezzük A-nak*, az *U*-ba bezártat *elnevezzük B-nek*. Ha csak annyi igaz, hogy mindkét részecske állandóan önmaga marad, vagy — másképpen fogalmazva, — az önkényesen választott név mindig ugyanazé a részecskéé, akkor a név a részecsketípus szerepét tölti be, és a találati valószínűsége nem kaphatunk mást, mint (140)-t.

A kvantummechanika szerint azonban azonos részecskénél a helyes valószínűséget nem a (140) képlet adja meg. Az előző bekezdés gondolatmenete — bármilyen nyilvánvalónak látszik is, — hibás. Senkisé nem tilthatja meg, hogy a részecskéknek nevet adjunk, amikor elkülönítve őrizzük őket, de — úgy látszik, — azt már nincs jogunk feltételezni, hogy miután kiszabadultak, folyamatosan őrzik az önazonosságukat. A „falak leomlása után” nemcsak mi nem tudjuk, melyik az *A* és melyik a *B* (azaz melyik jött *U*-ból, melyik *V*-ből), de ők maguk sem: hacsak nem követjük végig a részecskék pályáját, még gondolatban sem tételezhetjük fel, hogy a részecske, amit regisztrálunk, határozottan *vagy az U-ból, vagy a V-ből* érkezett — hasonlóan ahhoz, ahogy az interferométerben sem érvényes az a kép, hogy az egy szem neutron határozottan *vagy az egyik vagy a másik* résznyalábban mozog. Újabb példáját látjuk annak, hogy a klasszikusan egymást kizáró lehetőségek a mikrofizikában általában nem zárják ki egymást.

Nézzük most meg, hogyan módosul a kvantummechanika szerint a (140) találati valószínűség, amikor azonos részecskéket vizsgálunk.

Egy N db. azonos részecskéből álló rendszer hullámfüggvénye a $4N$ szabadsági fok függvénye. Nevezzük el a részecskéket gondolatban 1.-nek, 2.-nek s í.t. N -nek. Ne írjuk ki részletesen a részecskék koordinátáit és spinvetületét, hanem a részecske számával (nevével) szimbolizáljuk őket: ezzel sokat nyerünk áttekinthetőségben. Eszerint a konvenció szerint a rendszer hullámfüggvényét $\psi(1, 2, \dots, N)$ alakban írhatjuk.

Ebben a hullámfüggvényben azonban az 1., 2., ..., N pusztán név, és nem fejez ki fizikai különbséget a részecskék között. Ha bármelyik két részecske koordinátáit és spinvetületét felcseréljük egymással, a rendszer fizikai állapotát ezzel nem változtatjuk meg, ezért a felcserélés utáni hullámfüggvény legfeljebb fázisfaktorban különbözhet az eredetitől. Ha pl. az 1. és a 2. részecske koordinátáit és spinvetületét cseréljük fel, akkor teljesülnie kell a

$$\psi(2, 1, 3, \dots, N) = c \cdot \psi(1, 2, 3, \dots, N)$$

relációnak, amelyben c fázisfaktor.

Kiterjedt tapasztalati anyag igazolja, hogy a *fázisfaktor* — a rendszert alkotó részecskék típusától függően, — csak $+1$ vagy -1 lehet. A $c = +1$ -t követelő részecskéket *bozonoknak*, a $c = -1$ -t követelőket *fermionoknak* nevezzük.

Az azonos bozonokból álló rendszer hullámfüggvénye tehát *szimmetrikus*, az azonos fermionokból állóké *antiszimmetrikus* bármely részecskepár összes szabadsági fokának egyidejű felcserélésével szemben (*szimmetriaposztulátum*).

Melyik elemi részecske fermion és melyik bozon? A relativisztikus kvantummechanikában bebizonyítják, hogy a *félegész spinű részecskék fermionok*, az *egész spinűek bozonok*. A stabil anyagot tehát fermionok alkotják. A bozonok legfontosabb képviselője a foton ($s = 1$). Az alábbi megfontolásokban azonban — az egyszerűség kedvéért — a szimmetriaposztulátumot nem kapcsoljuk össze a spinnel: a hullámfüggvény szimmetriájának és antiszimmetriájának bizonyos fontos következményeit így is megállapíthatjuk.

A szimmetriaposztulátum következtében gondolatkísérletünk (138) hullámfüggvényét bozonok esetében szimmetrizálni, fermionok esetében antiszimmetrizálni kell:

$$\psi(x_A, x_B, t) \longrightarrow \psi_{\pm}(x_A, x_B, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi(x_A, t)\chi(x_B, t) \pm \varphi(x_B, t)\chi(x_A, t)]. \quad (141)$$

A felső előjel érvényes a bozonokra, az alsó a fermionokra, az $1/\sqrt{2}$ faktor a normáláshoz szükséges.

Annak valószínűségi sűrűsége, hogy valamilyen t időpillanatban az egyik részecskét az x_1 pontban, a másikat az x_2 pontban találjuk a következő:

$$\begin{aligned} p_{\pm}(x_1, x_2, t) &= |\psi_{\pm}(x_1, x_2, t)|^2 + |\psi_{\pm}(x_2, x_1, t)|^2 = \\ &= |\varphi(x_1, t)|^2 \cdot |\chi(x_2, t)|^2 + |\varphi(x_2, t)|^2 \cdot |\chi(x_1, t)|^2 \pm \\ &\pm [\varphi^*(x_1, t) \cdot \varphi(x_2, t) \cdot \chi^*(x_2, t) \cdot \chi(x_1, t) + \varphi^*(x_2, t) \cdot \varphi(x_1, t) \cdot \chi^*(x_1, t) \cdot \chi(x_2, t)]. \end{aligned} \quad (142)$$

Az azonos részecskékre vonatkozó p_{\pm} valószínűség a szögletes zárójel miatt különbözik a hasonló részecskékre érvényes p valószínűségtől⁵⁷.

⁵⁷Mivel az időtől függő Schrödinger-egyenlet őrzi az állapot normáját (30. fejezet), ez a valószínűség akkor is helyesen normált, amikor a φ és a χ hullámfüggvények már átfedik egymást.

Az alábbiakban a p_{\pm} és a p közötti különbség néhány következményét vizsgáljuk meg.

1) Mindenekelőtt megjegyezzük, hogy a két valószínűség csak akkor különbözik egymástól, ha a φ és a χ függvény *átfedődik* (ha az x -tengelyen van olyan tartomány, ahol egyik sem nulla). A gondolat kísérletben negatív t -nél ilyen tartomány nincs, ezért amíg a részecskéket egymástól elkülönítve őrizzük, az azonos részecskék és a hasonló részecskék ugyanúgy viselkednek — ha nem így volna, a hidrogénatom tárgyalásánál a világ összes elektronját és protonját figyelembe kellene venni.

2) Legyen ($t > 0$ -nál) az x olyan koordináta, amelyben φ is, χ is különbözik zérustól. Ha csak az egyik részecskét „engedjük ki” (ez lehet bármelyik), a találati valószínűség ennek a pontnak a dx környezetében (és az adott t -ben) $|\varphi(x, t)|^2 dx$ -el, ill. $|\chi(x, t)|^2 dx$ -el egyenlő. Ez így van akár hasonló, akár azonosak a részecskék.

Ha mindkét részecskét egyszerre engedjük ki és a részecskék hasonlóak, akkor együttes találati valószínűségük (140) szerint ennek a két valószínűségnek a szorzata, ahogy azt statisztikusan független részecskéktől el is várjuk. Az $x_1 = x_2 \equiv x$ -nél szükséges $1/2$ figyelembevételével ugyanis

$$p(x, x, t) \cdot \frac{1}{2} dx^2 = |\varphi(x, t)|^2 \cdot |\chi(x, t)|^2 \cdot dx^2 \quad (\text{Hasonló részecskék}).$$

Ha azonban a részecskék azonos fermionok, akkor annak valószínűsége, hogy mindkettőt az x koordinátájú pont környezetében találjuk, zérussal egyenlő:

$$p_{-}(x, x, t) \cdot \frac{1}{2} dx^2 = 0 \quad (\text{Azonos fermionok}).$$

Ebben az esetben ugyanis a (142) [] tagja előtt a negatív előjel érvényes és ez a tag pontosan kiejti az előzőket.

Ugyanerre a következtetésre jutunk közvetlenül a szimmetriaposztulátumból is: abból, hogy $\psi_{-}(x_A, x_B) = -\psi_{-}(x_B, x_A)$ következik, hogy $\psi_{-}(x, x) = 0$: ha egy adott pontban már van egy adott típusú fermion, ugyanabban a pontban nem lehet egy másik is⁵⁸.

Ha — végül — mindkét részecske azonos bozon, az előző esethez képest csak annyi a különbség, hogy a [] előtti előjel pozitív. De ha negatív előjelnél ez a tag pont kompenzálta az előzőeket, akkor most megduplázza őket. Ezért

$$p_{+}(x, x, t) \cdot \frac{1}{2} dx^2 = 2 \cdot |\varphi(x, t)|^2 \cdot |\chi(x, t)|^2 \cdot dx^2 \quad (\text{Azonos bozonok}).$$

A részecskék a három eset egyikében sem hatnak erővel egymásra, mégis csak az első esetben viselkednek úgy, ahogy független részecskéktől elvárjuk. A szimmetriaposztulátum korrelációt hoz létre közöttük, amely olyan, hogy a fermionok mintha taszítanák, a bozonok mintha vonzanák egymást.

⁵⁸Ha a spint is figyelembe vesszük, akkor ez az állítás túl erős: különböző spinvetületű fermionok lehetnek ugyanabban a pontban.

3) Vegyük elő újra a 94. feladatot, és gondoljuk át abban az esetben, amikor a két részecske (spinnélküli, 1-szabadsági fokú) fermion.

Könnyen meggyőződhetünk róla, hogy ha a feladatban kapott energiasajátfüggvényeket antiszimmetrizáljuk, attól ugyanolyan sajátenergiájú sajátfüggvények maradnak:

$$e_{n_1}(x_A)e_{n_2}(x_B) \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(e_{n_1}(x_A)e_{n_2}(x_B) - e_{n_1}(x_B)e_{n_2}(x_A)).$$

Csak egy eset kivétel: az, amikor $n_1 = n_2$. A fenti hullámfüggvény ugyanis ekkor zérus. Ez egy általános érvényű következtetés a nemkölcönható fermionrendszerekben és úgy fogalmazható, hogy *két azonos fermion nem lehet ugyanabban a kvantumállapotban (Pauli-elv vagy kizárási-elv)*. A rendszer legalacsonyabb energiája a Pauli-elv következtében nagyobb, mint amikor a részecskék csak hasonlóak: $\hbar\omega$ helyett $2\hbar\omega$ -val egyenlő.

Az $E_n = \hbar\omega(n+1)$ energiájú nívó elfajultsága a részecskék azonossága következtében $(n+1)$ -ről az $\frac{n+1}{2}$ tört egész részére csökken. Ennek az az oka, hogy az n_1, n_2 kvantumszám-pár ugyanarra az antiszimmetrizált energiasajátfüggvényre vezet, mint az n_2, n_1 pár.

Tetszőleges N -nél az alapállapot energiája a Pauli-elv figyelembevételével az N legalacsonyabb harmonikus-oszcillátor nívó energiájának az összege:

$$E_{\text{alapállapot}} = \hbar\omega \sum_{n=0}^N \left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{\hbar\omega}{2} \cdot N^2.$$

Ezt úgy szokás kifejezni, hogy az első N nívó van „betöltve” részecskékkel. Az alapállapotban a legmagasabb betöltött nívó E_F energiáját *Fermi-energiának* nevezzük. Tetszőleges N -nél $E_F = \hbar\omega \left(N - \frac{1}{2}\right)$.

Rendszám	Vegyjel	Elektronkonfiguráció
1	H	$1s$
2	He	$1s^2$
3	Li	$1s^2 2s$
4	Be	$1s^2 2s^2$
5	B	$1s^2 2s^2 p$
6	C	$1s^2 2s^2 p^2$
7	N	$1s^2 2s^2 p^3$
8	O	$1s^2 2s^2 p^4$
9	F	$1s^2 2s^2 p^5$
10	Ne	$1s^2 2s^2 p^6$
11	Na	$1s^2 2s^2 p^6 3s$
12	Mg	$1s^2 2s^2 p^6 3s^2$
13	Al	$1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p$
14	Si	$1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^2$
15	P	$1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^3$
16	S	$1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^4$
17	Cl	$1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^5$
18	Ar	$1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6$

4)Ha a fermionok egymással is kölcsönhatnak, a helyzet lényegesen bonyolultabbá válik. A Pauli-elv érvényét veszti, mert nem lehet egyszerűen azt mondani, hogy az N -fermion rendszer energiája az egy fermionot tartalmazó rendszer energianívóiból épül fel úgy, hogy ez utóbbi energianívói közül N db különbözőt „betöltünk” egy-egy fermionnal.

Érdekes, és egyáltalán nem nyilvánvaló, hogy ez a kép közelítően mégis sok esetben érvényben marad. Erre a legfontosabb példa az atom elektronburka: a Z rendszámú atom Z db elektronjának a kvantumállapotáról a valósághoz közeli képet kapunk, ha feltesszük, hogy alapállapotban a $Z|e|$ nagyságú ponttöltéshez tartozó Coulomb-probléma alsó Z energianívóját töltik be.

Az atomok elektronkonfigurációját ennek a képnek az alapján a következő módon szokás leírni. A főkvantumszámot számjeggyel írják ki, de az $l = 0, 1, 2, 3$ mellékvantumszámokat az s, p, d, f betűkkel jelölik. Így pl. a $3d$ elektron az $n = 3$ főkvantumszámú *elektronhéj* $2 \cdot 3^2$ db elfajult nívója közül az $l = 2$ mellékvantumszámú *alhéj* egy nívóját „tölti be”. Az l kvantumszámú nívó $2(2l + 1)$ -szer elfajult,

maximum ennyi elektronnal lehet betölteni. Az alhéjon található elektronok számát a hatványkitevőben tüntetik fel (ld. a táblázatot).

A periódusos rendszer legkisebb rendszámú atomjainak a konfigurációját ebben a jelölésben a fenti táblázat tartalmazza.

Az s^2 , p^6 , d^{10} stb. konfigurációk a *lezárt alhéjak*. Ezek stabil képződmények, a kémiai reakciókban nem vesznek részt. Különlegesen stabilisak azok az atomok, amelyekben egy héj zárul le (a táblázatban $Z = 2, 10$). A lezárt héjakból és alhéjakból kiindulva magyarázható, hogy a hélium, a neon és az argon nemes gáz. A kémiai affinitást a lezárt héjak elektronjai határozzák meg.

Emlékeztetünk rá, hogy az elektronok Coulomb-kölcsönhatása miatt ez a kép csak közelítő érvényességű. Az elektronok valójában nem csak a pontszerű atommag Coulomb-terét érzik, hanem egymás *átlagterét* is. Ez utóbbinak a jelentősége a rendszám növekedésével egyre nagyobb. Az átlagtér hatása nyilvánul meg abban, hogy adott n -nél az alhéjak nem pontosan azonos energiájúak.

5)A hidrogénatom stabilitása nem múlik azon, hogy az elektron fermion. A sok-elektronos atomok azonban egészen mások lennének, ha az elektronok nem lennének azonos fermionok. Ez méginkább érvényes a makroszkópikus anyagdarabokra. Megmutatható (Dyson, 1967), hogy *ha az anyagot alkotó elemi részek egyike sem lenne fermion, akkor az anyagnak az a formája, amit ma ismerünk, nem lenne stabil.*

Az anyag mindennapos formáiban az elektronok és az atommagok sokkal messzebb vannak egymástól, mint amekkorák, ezért a makroszkópikus anyag térfogatának csak elenyésző részét töltik ki. A sokkal nagyobb rész vákuum. Ez az elektronok azonos fermion-voltából eredő taszító jellegű korrelációnak a következménye. Ha az elektronok nem lennének azonos fermionok, az anyag annyira összeroppanna, hogy az atommagok érintkezésbe kerülnének egymással.

3.62. Záró megjegyzések

A tárgyalásunkat azzal indítottuk, hogy felsoroltunk néhány olyan alapjelenséget, amelyek ellentmondanak a klasszikus mechanikának és elektrodinamikának. Közülük csak egy jelenségtípusra adtuk meg a magyarázatot.

A hőmérsékleti spektrumot a következő félévben, a statisztikus fizika utolsó fejezeteinek egyikében vezetjük le.

A fotoeffektus a kvantumelektrodinamikához tartozik, ez a tárgy azonban nem szerepel a tantervben.

Az exponenciális bomlási törvényt időhiány miatt nem elemeztük. A végtelen potenciálgödörből indulhattunk volna ki. Legyen $t < 0$ -ban a részecske — mondjuk — az alapállapotban. Tegyük fel, hogy a $t = 0$ pillanatban az egyik falat hirtelen — a hullámfüggvény megváltoztatása nélkül —, magas széles potenciálfalal helyettesítjük, amelynek kicsi de nemnulla T transzmissziós koefficiense van.

Az eredmény az lesz, hogy a részecske elkezd lassan „átalagutazni” a falon kívüli tartományba és eltávozik a végtelenbe. A folyamat az időfüggő Schrödinger-egyenlet

alapján tárgyalható, és arra vezet, hogy a gödrön belüli találati valószínűség exponenciálisan csökken az idő függvényében.

Az előadásokban megadtuk azokat az alapokat, amelyek lehetővé teszik a vonalas spektrum és a planetáris atommodell (a hidrogénatom) sikeres értelmezését. Emellett természetesen több olyan problémát tárgyaltunk, amelyek a kvantumelmélet megjelenése előtt még nem léteztek és csak az elmélet fokozatos kiépítése során merültek fel. Ide tartozik a neutronok interferenciája, a spinkorrelációs kísérletek és az azonos részecskék kvantumelmélete.