

Benedict Mihály

Kvantummechanika

számítógépes animációkkal

II. RÉSZ

Animációk, feladatok, ábrák, tesztek:

Czirják Attila

Dömötör Piroska

Földi Péter





Szegedi Tudományegyetem

Elméleti Fizikai Tanszék

Szeged 2010

ÚTMUTATÓ

Techinkai okokból itt megismételjük az I. rész elején található, az animációk indításához szükséges programokat összegyűjtő listát:

SZÜKSÉGES PROGRAMOK	
	Az interaktív tartalmak egy részének megjelenítéséhez szükséges a java környezet (JRE) letöltése és telepítése. A bal oldali linkre kattintva letölthetjük az operációs-rendszerünknek megfelelő java környezetet.
	Az interaktív tartalmak másik részének megjelenítéséhez a Mathematica Notebook Player 7 vagy a Wolfram CDF Player program megléte szükséges. Ez utóbbi a bal oldali linkre kattintva letölthető.
	A videók jelentős része flv formátumú Flash videó. Ezeket a „szokásos médialejátszók” általában csak a megfelelő Adobe-Flash plugin megléte esetén képesek lejátszani. Ezt a bal oldali linkre kattintva az Adobe honlapjáról tölthetjük le. Az swf formátumú flash animációk megtekintéséhez pedig mindenképpen szükséges ez a plugin.
	A flash videók lejátszására a másik lehetőség, hogy letöltsük az ingyenesen elérhető VLC Media Player -t. Ez a program rendkívül sokféle videó- és hang formátumot kezel, többek között az flv formátumú videókat is lejátsza.

Tartalomjegyzék

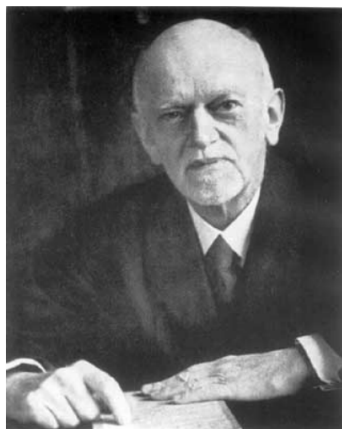
18. Hilbert-tér és lineáris operátorai, Dirac-jelölés	87
18.1. Lineáris operátorok	89
18.2. Reprezentációk, operátorok mátrixa	90
18.3. Bázisváltás, más kifejtési együtthatók	92
18.4. Projekciós operátor	93
19. Önadjungált operátorok spektrális előállítása	94
20. Fölcserélhető operátorok, CSCO	97
20.1. Fölcserélhető operátorok sajátvektorairól	97
20.2. Fölcserélhető operátorok teljes rendszere: CSCO	97
21. L^2 és az L^2-höz nem tartozó bázisok	98
21.1. Az L^2 tér definíciója	98
21.2. Az L^2 -höz nem tartozó, általánosított bázisok	102
21.2.1. Síkhullámok	102
21.2.2. Delta-függvények	102
21.2.3. Egyéb általánosított bázisok	103
22. A koordináta és az impulzus operátora	103
22.1. X és P nem fölcserélhető	105
23. A kvantummechanika posztulátumai	106
24. Mérések, középérték, szórás	108
25. Heisenberg-egyenlőtlenség	109
26. Időfejlődés, kontinuitási egyenlet	113
26.1. A Schrödinger-egyenlet általános tulajdonságai	113
26.2. Kontinuitási egyenlet	114
27. A várható értékek időfejlődése, Ehrenfest tétele	115
28. Konzervatív rendszerek	116
29. Mozgásállandók, Bohr-frekvenciák	117
29.1. Mozgásállandók	117
29.2. Bohr-frekvenciák és a kiválasztási szabályok eredete	118
30. A szabad részecske kvantummechanikai tárgyalása	119
31. A harmonikus oszcillátor sajátérték-problémája	121
32. Nemstacionárius állapotok harmonikus potenciálban, koherens és préselt állapotok	126
32.1. Koherens állapotok	128
32.2. Préselt koherens állapotok	131
33. Az impulzusnyomaték algebrai elmélete	132
34. Feles spin sajátállapotai	137

35. Pályaimpulzusnyomaték	139
36. A térbeli paritás	144
36.1. A paritás definíciója	144
36.2. Kapcsolat a pályaimpulzusmomentummal	145
37. Centrális erőter, radiális egyenlet	147
38. A radiális egyenlet megoldásainak aszimptotikus viselkedése	149
38.1. Aszimptotikus viselkedés $r \rightarrow \infty$ esetén	149
38.2. Aszimptotikus viselkedés a 0 környezetében	149
39. Coulomb-potenciál kötött állapotai	150
40. A H-atom spektruma	152
41. Több részecske rendszerek és azonos részecskék	159
42. Független részecskék	164
42.1. Azonos független részecskék alapállapotai	165
43. Többelektronos atomok	167

18. Hilbert-tér és lineáris operátorai, Dirac-jelölés

A Kvantumfizika alapjai c. részben láttuk, hogy a mikrorészecskék tulajdonságai magyarázhatók egy matematikai képpel, melyben a részecske állapotváltozásait komplex számokkal, valószínűségi amplitúdókkal írjuk le. Ezeket egy ψ absztrakt állapotból egy másik φ állapotba való átmenethez rendeljük, és $\langle\varphi|\psi\rangle$ -vel jelöljük. Ennek abszolút érték négyzete mondja meg azt, hogy mekkora az átmenet valószínűsége. Ha a ψ állapotú részecskék valamilyen tulajdonságát egy alkalmas berendezéssel mérjük, akkor azt találjuk, hogy a berendezés a részecske állapotát megváltoztatja, és ez általában több különböző lehetséges módon történhet. A berendezés után a részecske állapota valamilyen a berendezésre jellemző u_i állapot lesz, ezek a berendezés sajátállapotai. Az egyes sajátállapotokba $\langle u_i|\psi\rangle$ valószínűségi amplitúdóval azaz $|\langle u_i|\psi\rangle|^2$ valószínűséggel kerülnek a részecskék. Valójában magát a ψ állapotot önmagában nem is tudjuk megadni. A ψ megadása éppen úgy történik, hogy megmondjuk, hogy valamilyen kiválasztott berendezés esetén annak egyes kimenő csatornáiba, amelyek lehetnek diszkrét vagy folytonosak, mekkora amplitúdóval jut a részecske. Az állapotról akkor lehet konkrétan beszélni, tehát éppen azáltal tudjuk jellemezni, hogy megmondjuk, mekkorák ezek az amplitúdók valamilyen kiválasztott mennyiség mérése szempontjából. Megjegyezzük még, hogy mivel egy részecske állapota szükségképpen megváltozik a mérés során, a konkrét méréshez az szükséges, hogy sok azonos módon preparált részecskével végezzünk mérést. Ha a részecskén semmifajta mérést nem végeztünk, vagy nem minden lehetséges amplitúdóját ismerjük, az állapotot akkor is lehet alkalmas módon jellemezni, erről azonban itt egyelőre nem lesz szó.

David Hilbert (1862-1943)



Neumann János (1903-1957)



1. ábra.

Eme tapasztalatok alapján a kvantummechanika kialakulása után rövidesen kiformalódott az a matematikai keret, amely alkalmas a mikrorészecskék tulajdonságainak tárgyalására. Ezt a hátteret, amely a Hilbert-terek lineáris operátorainak elméletén alapul, a matematikai egzaktság minden követelményének megfelelően Neumann János dolgozta ki. Ennek lényege, hogy a részecskék állapotait egy lineáris, belső szorzat struktúrával is ellátott vektortér elemeinek kell tekinteni, a jellemző fizikai mennyiségeknek pedig a téren értelmezett lineáris operátorok felelnek meg. A mondott megfeleltetés pontosabb részleteit a következőkben majd axiómaszerűen is ki fogjuk mondani, előbb azonban bevezetjük az állapottér, azaz a Hilbert-tér fogalmát.

Jelölésünkben Dirac nyomán a vizsgálandó halmaz, a \mathfrak{H} Hilbert-tér elemeit a $|\psi\rangle, |\varphi\rangle, |\phi\rangle, |\chi\rangle$ módon fogjuk jelölni, amelyekre a közönséges háromdimenziós vektorokhoz nagyon hasonló tulajdonságok érvényesek, azaz az elemeket össze lehet adni és komplex számmal szorozni, és ezek ismét a tér elemei lesznek. Másképpen szólva a tér elemein két művelet definiálható, a kommutatív és asszociatív összeadás és a számmal való szorzás. Azaz $|\psi\rangle + |\varphi\rangle$ és $c|\psi\rangle$ is a tér eleme, ahol c egy

komplex szám. A szorzó komplex voltának lehetősége miatt bonyolultabb a vizsgált tér a közönséges vektorok terénél, mindazonáltal \mathfrak{H} elemeit vektoroknak is szokás nevezni. A $|\cdot\rangle$ jelölés a \mathfrak{H} tér elemeire P. Diractól származik, és csak a kvantummechanika fizikai irodalmában használatos, alább látni fogjuk ennek a jelölésnek az indokát és bizonyos előnyeit.

A \mathfrak{H} tetszőleges elemeire érvényes, hogy

I. $|\psi\rangle + |\varphi\rangle = |\varphi\rangle + |\psi\rangle$ kommutatív, $|\psi\rangle + (|\varphi\rangle + |\chi\rangle) = (|\psi\rangle + |\varphi\rangle) + |\chi\rangle$, asszociatív, létezik egyetlen olyan vektor \emptyset , amelyre $|\psi\rangle + \emptyset = |\psi\rangle$,

II. $a(|\psi\rangle + |\varphi\rangle) = a|\psi\rangle + a|\varphi\rangle$, $(a+b)|\psi\rangle = a|\psi\rangle + b|\psi\rangle$, $a(b|\psi\rangle) = (ab)|\psi\rangle$, $1|\psi\rangle = |\psi\rangle$, $0|\psi\rangle = \emptyset$.

Az utolsó tulajdonság miatt a 0 szám és a \emptyset vektor között a továbbiakban nem kell különbséget tenni.

Lineáris függetlenség. A $c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle + \dots + c_n|\varphi_n\rangle$ alakú kifejezést a $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$ elemek lineáris kombinációjának nevezzük. A $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$ elemeket lineárisan függetleneknek nevezzük, ha a $c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle + \dots + c_n|\varphi_n\rangle = 0$ összefüggés csak a $c_1 = c_2 = \dots = c_n = 0$ esetben teljesül. Egyébként a vektorok lineárisan összefüggők. A vektortér véges és éppen n dimenziós, ha létezik n számú lineárisan független vektor, de ennél több már nincs. Ha tetszőleges számú lineárisan független elem létezik, akkor a tér végtelen dimenziós.

A kvantummechanikai leírás a lineáris térnél gazdagabb struktúrát követel, ezért definiáljuk a vektorok skaláris vagy belső szorzatát is. Egy rendezett $|\psi\rangle, |\varphi\rangle$ elempárhoz egy komplex számot rendelünk: ezt két ekvivalens módon is fogjuk írni: $(|\psi\rangle, |\varphi\rangle)$ illetve $\langle\psi|\varphi\rangle$ vagyis

$$(|\psi\rangle, |\varphi\rangle) \equiv \langle\psi|\varphi\rangle. \quad (18.1)$$

Ez a közönséges belső szorzattal majdnem azonos tulajdonságokkal rendelkezik. A második tényezőben lineáris:

$$(|\psi\rangle, |\varphi\rangle + |\chi\rangle) = \langle\psi|\varphi\rangle + \langle\psi|\chi\rangle, \quad \langle\psi|a\varphi\rangle = a\langle\psi|\varphi\rangle, \quad (18.2)$$

de a tényezők sorrendjének fölcserélésekor az eredmény a komplex konjugált szám

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^* \quad (18.3)$$

s emiatt

$$\langle a\psi|\varphi\rangle = a^* \langle\psi|\varphi\rangle. \quad (18.4)$$

(18.3)-ból következően $\langle\psi|\psi\rangle$ valós, és posztuláljuk, hogy

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0, \text{ és } \langle\psi|\psi\rangle = 0 \text{ akkor és csak akkor, ha } |\psi\rangle = 0. \quad (18.5)$$

A vektor hossza, vagy normája $|\psi| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$. Az ilyen módon kapott tér egy belső szorzattér, vagy véges dimenziós esetben szokásos a komplex euklideszi tér elnevezés is.

A belső szorzat segítségével értelmezhető két vektor, a ψ és φ távolsága, amelyet $|\psi - \varphi|$ definiál. Értelmezhető az elemek sorozata, illetve a távolság fogalmának fölhasználásával a konvergencia illetve a határpont is. Ha a vektortér véges dimenziós, akkor a valós számokra vonatkozó ismert tételhez hasonlóan meg lehet mutatni, hogy minden Cauchy-sorozat konvergens a térben. Azaz, ha φ_n egy olyan sorozat, hogy $|\varphi_n - \varphi_m|$ tetszőlegesen kicsivé válik valahányszor n és m is elegendően nagy (ezt nevezzük Cauchy-sorozatnak), akkor a sorozat konvergens, vagyis létezik olyan φ elem a térben, hogy $|\varphi_n - \varphi| \rightarrow 0$, azaz $\varphi_n \rightarrow \varphi$. Végtelen dimenziós térben ez nem föltétlenül van így. Ha így van, akkor az a tér egy további, az előzőektől független tulajdonsága, és ekkor a teret *teljesnek* nevezzük. A lineáris belső szorzatteret, amelyben minden Cauchy-sorozat konvergens, tehát ebben az értelemben teljes is, Hilbert-térnek nevezzük. A véges dimenziós euklideszi tér – teljes lévén – automatikusan Hilbert-tér is.

Altérnek nevezzük a tér azon részhalmazait, amelyek maguk is rendelkeznek a fönnebb kirótt tulajdonságokkal. Két triviális altér létezik, az egyik a teljes tér, a másik a csak a 0 vektorból álló tér.

Fönnebb már Dirac jelölését alkalmaztuk, Dirac matematikus kortársainak eredményeitől függetlenül lényegében maga is megfogalmazta ezeket a tulajdonságokat. A lineáris tér elemeire a belső

szorzat fönt használt jelöléséből kiindulva, magukat a vektorokat is ellátta a zárójel felével, azaz a φ vektorra a $|\varphi\rangle$ jelölést vezette be, és ezeket *ket*-nek nevezte. A $\langle\psi|\varphi\rangle$ skaláris szorzatot pedig úgy tekintette, mint egy a ketek halmazán vett komplex értékű lineáris függvényt, funkcionált. Az összes ilyen funkcionál halmaza a ketek terének duálisa, maga is lineáris tér. Ezen tér elemeit Dirac $\langle\psi|$ -vel jelölte és ezeket *bra* vektoroknak nevezte el. A bra és a ket szavak a $\langle | \rangle$ jel angol elnevezésének “bracket” megfelelő részeire utalnak. A bra vektorok a következő tulajdonságúak:

$$\langle a\psi + b\varphi| = a^* \langle\psi| + b^* \langle\varphi|. \quad (18.6)$$

Megjegyezzük, hogy a lineáris tér fogalma logikailag független a belső szorzat létezésétől, ez utóbbi egy további gazdagítása a lineáris tér matematikai struktúrájának. Mivel azonban a természet kvantumos jelenségeinek leírásához ez a gazdagabb struktúra szükséges, a Dirac-féle jelölés már eleve utal a belső szorzat jelenlétére. Ennek a jelölésmódnak, mint alább látni fogjuk, a formalizmus alkalmazásakor jelentős előnyei vannak.

Érvényes a Cauchy-Bunyakovszkij-Schwarz-egyenlőtlenség:

$$|\langle\psi|\varphi\rangle| \leq |\psi| |\varphi|. \quad (18.7)$$

A $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$ elemekről azt mondjuk, hogy ortogonális és normált – röviden *ortonormált* – bázist alkotnak az n dimenziós térben, ha egyikük sem a nulla vektor, és

$$\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{ha } i = j \\ 0 & \text{ha } i \neq j. \end{cases} \quad (18.8)$$

Az így megadott vektorrendszer valóban bázist alkot, azaz elemei lineárisan függetlenek. Tekintsük ugyanis a $c_1 |\varphi_1\rangle + c_2 |\varphi_2\rangle + \dots + c_n |\varphi_n\rangle = 0$ egyenlőséget, és szorozzuk meg azt skalárisan $\langle\varphi_k|$ -val $k = 1, 2, \dots, n$. Az ortonormáltság miatt kapjuk, hogy $c_k \langle\varphi_k|\varphi_k\rangle = 0$ minden k -ra, azaz $c_k = 0$, minden k -ra, ez pedig éppen azt jelenti, hogy a fenti vektorok lineárisan függetlenek. Az algebrából ismert Gram-Schmidt-féle ortogonalizációs eljárással lineárisan független vektorokból, páronként ortogonális vektorrendszer képezhető.

18.1. Lineáris operátorok

Egy mikrorészecskét egy valamilyen fizikai mennyiséget mérő mérőberendezésbe juttatva, a mikrorészecske állapota megváltozik, ez az oka annak, hogy a mérőberendezéseket, illetve az általuk mért fizikai mennyiségeket a kvantummechanikában operátorokkal írjuk le, amelyek a vektorokat egymásba transzformálják.

Egy a \mathfrak{H} -ból sajátmagába képező $|\varphi\rangle \rightarrow A|\varphi\rangle = |\psi\rangle$ transzformációt *lineáris operátornak* nevezünk, ha teljesül a következő két összefüggés:

$$A(|\varphi\rangle + |\chi\rangle) = A|\varphi\rangle + A|\chi\rangle, \quad \text{és} \quad A(c|\varphi\rangle) = cA|\varphi\rangle, \quad (18.9)$$

ahol c komplex szám. A linearitásból következik, hogy a 0 vektorhoz minden lineáris operátor a 0 vektort rendeli hozzá.

Pontosabban a $|\varphi\rangle \rightarrow A|\varphi\rangle = |\psi\rangle$ leképezést, mely \mathfrak{H} valamely D_A részhalmazát (A értelmezési tartományát) \mathfrak{H} egy másik R_A részhalmazára képezi le lineáris operátornak nevezünk, ha minden $\varphi, \chi \in D_A$ elemre teljesülnek a (18.9) összefüggések. Két operátor egyenlő, ha értelmezési tartományuk megegyezik, és minden $|\varphi\rangle$ -re $A|\varphi\rangle = B|\varphi\rangle$.

Megmutatható, hogy véges dimenzióban a lineáris operátorok értelmezési tartománya természetes módon kiterjeszthető a teljes térre, amennyiben nem lennének a \mathfrak{H} tér minden vektorán értelmezve. Végtelen dimenzióban ez csak az úgynevezett korlátos operátorokra igaz. Az A operátort korlátosnak nevezzük, ha létezik olyan pozitív C szám, hogy tetszőleges φ -re $|A\varphi| \leq C |\varphi|$. Egyszerű megmutatni, hogy az A operátor korlátossága ekvivalens azzal a tulajdonsággal, hogy tetszőleges φ -hez tartó φ_n sorozatra az $A\varphi_n$ sorozat $A\varphi$ -hez tart. Ez utóbbi tulajdonság a folytonosság. Nem nehéz belátni, hogy véges dimenziós térben minden lineáris operátor korlátos, tehát folytonos, így a teljes térben értelmezhető.

A kvantummechanikai problémákhoz tartozó Hilbert-terek általában végtelen dimenziósak és az előforduló fizikai mennyiségek operátorai nem korlátosak. Ezért az alább következő állítások további föltételek és általánosítások nélkül matematikai szigorúsággal csak véges dimenziós esetben érvényesek, de a föltételek alkalmas finomításaival (az értelmezési tartomány megjelölésével, megfelelő kikötések és kiterjesztések segítségével) nagyon sok tekintetben végtelen dimenzióra is átvihetők, ezekről a matematikai irodalom tanulmányozásával tájékozódhatunk.

Operátorok összegét és számmal való szorzatát a következő formulák értelmezik:

$$(A + B) |\varphi\rangle = A |\varphi\rangle + B |\varphi\rangle, \quad (18.10)$$

$$(cA) |\varphi\rangle = cA |\varphi\rangle. \quad (18.11)$$

Az összeadás a linearitásból következően könnyen beláthatóan asszociatív $(A + B) + C = A + (B + C)$ és kommutatív: $A + B = B + A$. A hatását a $|\psi\rangle$ vektorra kétféleképpen is fogjuk írni:

$$A |\psi\rangle \equiv |A\psi\rangle. \quad (18.12)$$

Az I -vel jelölt egységoperátor hatása minden vektorra $I |\psi\rangle = |\psi\rangle$, a 0 operátort pedig a $0 |\psi\rangle = 0$ definiálja.

Két operátor szorzata $AB |\varphi\rangle = A |B\varphi\rangle$. Az összeadás a szorzásra nézve disztributív. Általában $AB |\varphi\rangle$ és $BA |\varphi\rangle$ két különböző vektor, azaz $AB \neq BA$: a két operátor általában *nem fölcserélhető*. Bevezetve az

$$[A, B] := AB - BA \quad (18.13)$$

definícióval két operátor *kommutátorát*, másképpen azt mondhatjuk, hogy két operátor kommutátora általában nem 0 .

Inverz operátor: Azt mondjuk, hogy az A operátornak van inverze, ha létezik olyan A^{-1} -el jelölt operátor, amelyre $AA^{-1} = A^{-1}A = I$. Ez az A^{-1} az A operátor inverze, továbbá láthatólag $(A^{-1})^{-1} = A$.

Nem minden operátornak van inverze, de ha van, akkor az egyértelműen meghatározott. Ha úi. A -nak B és C is inverze, akkor $AB = I = AC$ lenne, így $B - C = B(AB - AC) = 0$, azaz $B = C$. Belátható, hogy az inverz létezésének szükséges és elegendő föltétele az, ha bármely $|\psi\rangle$ -hez egy és csak egy olyan $|\varphi\rangle$ vektor van amelyre $A |\psi\rangle = |\varphi\rangle$.

18.2. Reprezentációk, operátorok mátrixa

Legyen $|u_i\rangle$ egy ortonormált bázis a téren. Ekkor egy $|\psi\rangle$ vektor kifejthető a bázis vektorai szerint valamilyen c_i együtthatókkal $|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$. A c_i együtthatók megkaphatók, ha megszorozzuk ezt a kifejtést skalárisan magukkal a bázisvektorokkal. A belső szorzat linearitása és a bázis ortonormáltsága miatt kapjuk, hogy: $\langle u_j | \psi \rangle = \sum_i c_i \langle u_j | u_i \rangle = c_j$. Ily módon a $|\psi\rangle$ kifejtése az alábbi módon is írható

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i | \psi \rangle. \quad (18.14)$$

Az $\langle u_i | \psi \rangle = c_i$ számokat a $|\psi\rangle$ vektor *reprezentációjának* szokás nevezni az $|u_i\rangle$ bázison, és ezeket gyakran egy oszlopba írva adjuk meg a $|\psi\rangle$ vektort. Két vektor skaláris szorzatát $\langle \psi | \varphi \rangle$ -t az $|u_i\rangle$ bázis segítségével a következőképpen számíthatjuk ki. Legyen $|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$ és $|\varphi\rangle = \sum_j b_j |u_j\rangle$, ekkor:

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \left\langle \sum_i c_i u_i \left| \sum_j b_j u_j \right. \right\rangle = \sum_i c_i^* b_i. \quad (18.15)$$

A Dirac-féle beszédmód itt a következő: alkalmazzuk a $|\varphi\rangle$ -re a $\langle \psi | = \sum_i c_i^* \langle u_i |$ bra vektort. A c_i^* sorvektor a $\langle \psi |$ bra reprezentációja az $|u_i\rangle$ bázisban. A c_i és b_i kifejtési együtthatók egyenként függenek attól, hogy mi az a bázis amelyet használunk, de maga a $\sum_i c_i^* b_i$ skalárszorzat ettől független. Egyszerű megmutatni, hogy egy másik bázisban kiszámítva a belső szorzatot az eredmény ugyanaz a szám.

Tekintsük most az előbb látott $|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i|\psi\rangle$ (18.14) összefüggést. Ezt úgy is fölfoghatjuk, hogy ha a $\sum_i |u_i\rangle \langle u_i|$ -vel skalárisan megszorozzuk a $|\psi\rangle$ -t, akkor $|\psi\rangle$ -t önmagát kapjuk vissza, azaz ez az összeg úgy viselkedik mint az egységoperátor:

$$\sum_i |u_i\rangle \langle u_i| = I. \quad (18.16)$$

Most megmutatjuk, hogy egy ilyen típusú írásmód tetszőleges lineáris operátorra átvihető. Tekintsünk egy A lineáris operátort. Ez egyértelműen meg van határozva, ha egy $|u_i\rangle$ ortonormált bázison megadjuk a hatását. Ugyanis $A|u_i\rangle = |\phi_i\rangle$ minden i -re maga is egy-egy vektor a térben, tehát maga is kifejezhető az $|u_i\rangle$ bázison:

$$A|u_i\rangle = |\phi_i\rangle = \sum_k a_{ki} |u_k\rangle \quad (18.17)$$

valamilyen a_{ki} komplex számokkal, s így egy tetszőleges

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i|\psi\rangle \quad (18.18)$$

vektorra:

$$A|\psi\rangle = \sum_i A|u_i\rangle \langle u_i|\psi\rangle = \sum_{i,k} a_{ki} |u_k\rangle \langle u_i|\psi\rangle. \quad (18.19)$$

Ezt az eredményt Dirac nyomán úgy szokás írni, hogy

$$A = \sum_{i,k} a_{ki} |u_k\rangle \langle u_i|. \quad (18.20)$$

Az $|u_k\rangle \langle u_i|$ mennyiségeket, amelyek a fentiek szerint maguk is lineáris operátorok a bázisvektorok *külső szorzatának* (*diádjának*) is szokás nevezni. Látható tehát, hogy egy belső szorzat struktúrával is rendelkező térben minden lineáris operátor egy ortonormált bázis vektoraiból alkotott összes lehetséges diád valamilyen lineáris kombinációjaként írható föl. (A lineáris operátor fogalmához egyébként általában nincs szükség a belső szorzatra, viszont az utóbbi hiányában a (18.20) alak nem is értelmezhető.) Az a_{ki} számokat az A operátor *mátrixelemeinek* nevezzük az $|u_i\rangle$ ortonormált bázisban, és ezeket explicit módon meghatározhatjuk az $A|u_i\rangle = \sum_k a_{ki} |u_k\rangle$ (18.17) összefüggés alapján. Az utóbbit skalárisan szorozva $\langle u_j|$ -vel és a bázis ortonormáltságát fölhasználva ugyanis azt kapjuk, hogy $a_{ji} = \langle u_j| Au_i\rangle \equiv \langle u_j| A|u_i\rangle$, azaz a (18.20)-ban szereplő mátrixelemek közvetlenül kiszámíthatóak az

$$a_{ki} = \langle u_k| Au_i\rangle \equiv \langle u_k| A|u_i\rangle \quad (18.21)$$

összefüggéssel. Az a_{ki} mátrixot, amely nyilvánvalóan függ a választott ortonormált bázistól szokás az A operátor *reprezentációjának* is nevezni az $|u_i\rangle$ bázisban. A fentiek alapján a $|\varphi\rangle = A|\psi\rangle$ transzformáció a $|\varphi\rangle = \sum_k b_k |u_k\rangle$ kifejtést felhasználva, a $\sum_k b_k |u_k\rangle = \sum_{i,k} a_{ki} |u_k\rangle \langle u_i|\psi\rangle = \sum_{i,k} a_{ki} |u_k\rangle c_i$ egyenlőség alapján az $|u_k\rangle$ reprezentációban $b_k = \sum_i a_{ki} c_i$ alakú. Azaz az $|u_k\rangle$ reprezentációban:

$$|\varphi\rangle = A|\psi\rangle \Rightarrow b_k = \sum_i a_{ki} c_i. \quad (18.22)$$

18.1 Feladat: Bizonyítsuk be a következő állításokat:

- (a) Operátorok összegének mátrixa a megfelelő mátrixok összege.
 - (b) Egy számmal szorított operátor mátrixa az operátor mátrixának számszorosa.
 - (c) Két operátor szorzatának mátrixa a megfelelő mátrixok szorzatával egyezik meg.
-

Adjungált operátor: A belső szorzat struktúra lehetővé teszi, hogy minden A lineáris operátorhoz hozzárendeljünk egy másik A^\dagger operátort a következőképpen. Írjuk elő, hogy tetszőleges $|\varphi\rangle$ és $|\psi\rangle$ esetén álljon fenn a

$$\langle\varphi|A\psi\rangle = \langle A^\dagger\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|A^\dagger\varphi\rangle^* \quad (18.23)$$

összefüggés. Az A^\dagger operátort A adjungáltjának nevezzük. A (18.23) követelmény az A^\dagger operátort egyértelműen meghatározza. Legyen az A operátor mátrixa az u_i bázisban $\langle u_k|Au_i\rangle = a_{ki}$, és számítsuk ki A^\dagger mátrixát a (18.23) összefüggés alapján:

$$\langle u_k|A^\dagger u_i\rangle = \langle u_i|Au_k\rangle^* = a_{ik}^*, \quad (18.24)$$

tehát az A mátrixából az A^\dagger mátrixa is kiszámítható, és pedig ha A mátrixa egy bázisban a_{ki} akkor az A^\dagger adjungált operátor mátrixa ugyanebben a bázisban a_{ik}^* , amelynek elemei láthatólag az A mátrix transzponáltjának komplex konjugáltjaként kaphatók meg. A mátrixelemek viszont meghatározzák A^\dagger hatását azon az ortonormált bázison, amelyben a mátrixot megadtuk. A linearitás miatt így A^\dagger minden vektoron meg van határozva, és alakja a (18.20) és (18.21) alapján a Dirac-féle jelölés szerint $A^\dagger = \sum_{i,k} a_{ik}^* |u_k\rangle\langle u_i|$, illetve az összegzési indexeket megcserélve:

$$A^\dagger = \sum_{i,k} a_{ki}^* |u_i\rangle\langle u_k|. \quad (18.25)$$

Vagyis az ilyen alakban felírt operátor adjungáltját úgy kapjuk, hogy a mátrixelemeket komplex konjugáljuk és a ket és bra vektorokat megcseréljük. Egyszerű megmutatni, hogy operátorok összegének adjungáltja az adjungáltak összege: $(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$. Számszorosnál pedig a komplex konjugálttal kell szorozni: $(cA)^\dagger = c^*A^\dagger$, továbbá

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger. \quad (18.26)$$

Azokat az operátorokat, amelyekre $A = A^\dagger$, *önadjungált*, másnéven hermitikus operátornak szokás nevezni (C. Hermite francia matematikus után). Az önadjungált operátorok mátrixának transzponáltja megegyezik a komplex konjugáltjukkal, és így a diagonálisban valós számok állnak.

18.3. Bázisváltás, más kifejtési együtthatók

Egy $|\psi\rangle$ vektort természetesen több különböző bázisban is megadhatunk. A kvantummechanika szóhasználatában ezt úgy mondjuk, hogy egy másik *reprezentációt* használunk. Egy reprezentációt tehát egy adott ortonormált bázis rögzít. Kérdés, mi a kapcsolat egy vektor kétfajta reprezentációja között? Ennek megvilágítása céljából bevezetjük az unitér operátor fogalmát:

Definíció: Unitérnek nevezzük az operátort, ha

$$U^\dagger U = U U^\dagger = I. \quad (18.27)$$

Az unitér operátorok megőrzik a skaláris szorzatot, tetszőleges $|\psi\rangle$, $|\varphi\rangle$ esetén $(U|\varphi\rangle, U|\psi\rangle) = \langle U\varphi|U\psi\rangle = \langle\varphi|U^\dagger U\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle$.

Legyen adva két ortonormált bázis $|\phi_i\rangle$, és $|\chi_k\rangle$. Legyen $|\psi\rangle$ kifejtése $|\psi\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle = \sum_k b_k |\chi_k\rangle$, illetve a másik bázisban $|\psi\rangle = \sum_k b_k |\chi_k\rangle$. Mivel $|\chi_k\rangle$ -k maguk is a tér elemei, kifejtethetők a $|\phi_i\rangle$ bázis segítségével is:

$$|\chi_k\rangle = \sum_i u_{ik} |\phi_i\rangle. \quad (18.28)$$

Ekkor $|\psi\rangle = \sum_k b_k |\chi_k\rangle = \sum_i \sum_k u_{ik} b_k |\phi_i\rangle$. Ezt szorozva $\langle\phi_j|$ -vel, vagy arra hivatkozva, hogy a kifejtési együtthatók egyértelműek $c_j = \sum_k u_{jk} b_k$. A (18.28) alapján $u_{jk} = \langle\phi_j|\chi_k\rangle$. Ezeket a mennyiségeket úgy tekinthetjük, mint az

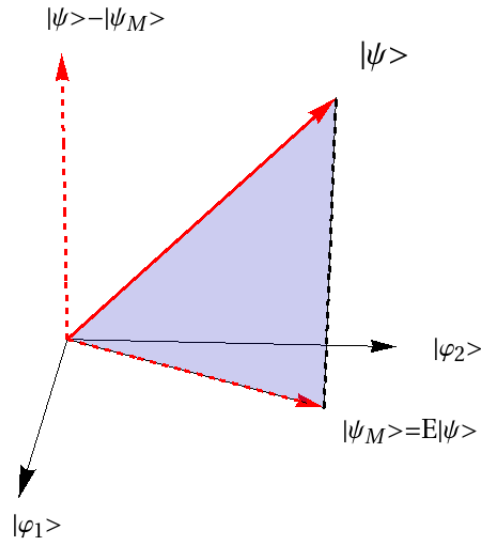
$$U = \sum_i |\chi_i\rangle\langle\phi_i| \quad (18.29)$$

operátor mátrixelemeit akár a $|\chi_k\rangle$ akár a $|\phi_k\rangle$ bázisban. Mivel $U^\dagger = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\chi_i|$, egyszerűen látható, hogy U unitér, azaz $U^\dagger U = U U^\dagger = I$. Megmutattuk tehát, hogy ortonormált bázis elemeit egyenként egy másik ortonormált bázis elemeibe transzformáló operátor unitér.

18.2 Feladat: Mutassuk meg a fenti állítás megfordítását: minden a (18.27) tulajdonsággal rendelkező, unitér operátor ortonormált bázist ortonormált bázisba transzformál.

18.4. Projekciós operátor

Legyen \mathfrak{M} altér a \mathfrak{H} Hilbert-térben. Azoknak a vektoroknak a halmazát, amelyek minden \mathfrak{M} -beli vektorra ortogonálisak az \mathfrak{M} ortogonális komplementerének nevezzük és \mathfrak{M}^\perp -el jelöljük. Egyszerűen látható, hogy \mathfrak{M}^\perp is altér, azaz két \mathfrak{M}^\perp -beli vektor összege és két \mathfrak{M}^\perp -beli vektor számszorosa is merőleges \mathfrak{M} -re. Legyen $|\varphi_i\rangle$ ($i = 1, 2, \dots$) bázis az \mathfrak{M} altérben. Tekintsünk egy $|\psi\rangle$ vektort \mathfrak{H} -ban és a $|\psi_M\rangle = \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle$ vektort, amely nyilvánvalóan \mathfrak{M} -ben van. Ezt a $|\psi_M\rangle$ -et a $|\psi\rangle$ merőleges vetületének nevezzük az \mathfrak{M} altérre (lásd 2. ábra). Tekintsük most a $|\psi_{M^\perp}\rangle = |\psi\rangle - |\psi_M\rangle = |\psi\rangle - \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle$ vektort. Ezt megszorozva skalárisan bármely $\langle\varphi_k|$ -val 0-t kapunk. Ezért ugyancsak 0-t kapunk, ha $\langle\varphi_k|$ bármely lineáris kombinációjával szorzunk, ami azt jelenti, hogy $|\psi_{M^\perp}\rangle$ ortogonális \mathfrak{M} -re, azaz \mathfrak{M}^\perp -ben van.



2. ábra. $|\psi\rangle$ merőleges vetülete az $|\varphi_1\rangle$ és $|\varphi_2\rangle$ által kifeszített altérre

Másképpen tehát $|\psi\rangle = |\psi_{M^\perp}\rangle + |\psi_M\rangle$, azaz a $|\psi\rangle$ -t fölbontottuk, az \mathfrak{M} -be és ortogonális komplementerébe tartozó elemekre. Ez a fölbontás egyértelmű. Ha ugyanis $|\psi\rangle = |\psi_{M^\perp}\rangle + |\psi_M\rangle = |\psi'_{M^\perp}\rangle + |\psi'_M\rangle$ lenne, akkor átrendezés után a $|\psi_M\rangle - |\psi'_M\rangle = |\psi'_{M^\perp}\rangle - |\psi_{M^\perp}\rangle = |\psi_0\rangle$ mind \mathfrak{M} -ben, mind a rá ortogonális \mathfrak{M}' -ben benne van, tehát $\langle\psi_0|\psi_0\rangle = 0$, azaz $|\psi_0\rangle$ a zéró vektor, amiből következik, hogy a fölbontás egyértelmű. A

$$\psi_M = \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle \quad (18.30)$$

összefüggést Dirac nyomán úgy tekinthetjük, mint az

$$E_M = \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \quad (18.31)$$

operátor hatását a $|\psi\rangle$ vektorra, amely az $E_M |\psi\rangle = |\psi_M\rangle$ összefüggés alapján előállítja a vetületet. Ezért az E_M operátort *projekciós operátornak* nevezzük. Ez láthatólag önadjungált és egyszerűen megmutathatóan idempotens, azaz $(E_M)^2 = E_M$. Ha $\mathfrak{M} = \mathfrak{H}$ a teljes tér, akkor a megfelelő $E_{\mathfrak{H}} = I$ (18.16)-nak megfelelően az egységoperátor. Ha viszont az összegben csak egy tag van, akkor az $E_{\varphi} = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ a $|\varphi\rangle$ vektor által generált egydimenziós altérre vetítő projekciós operátor. A fordított állítás is megmutatható, azaz igazolható, hogy minden önadjungált és idempotens operátor projekció.

19. Önadjungált operátorok spektrális előállítás

Egy kvantumos kísérlet, mint pl. az ezüstatomokkal végzett Stern-Gerlach-kísérlet során, az egyes mérési eredmények azt mutatják, hogy a bejövő állapot átalakul egy másik állapottá. Ez utóbbi a mérőberendezésre jellemző valamilyen állapot, amelyet korábban sajátállapotnak neveztünk. Egy részecskén végzett kísérlet során az állapot mindig valamilyen sajátállapotba megy át, de hogy melyikbe azt nem tudjuk. Egy mérés eredménye tehát $|\psi\rangle \rightarrow |u_i\rangle$, amit az $|u_i\rangle\langle u_i|$ projekció $|\psi\rangle \rightarrow |u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle$ hatásával írhatunk le, amely együtthatóként magában foglalja annak az $\langle u_i|\psi\rangle$ amplitúdóját is, hogy éppen az $|u_i\rangle$ állapotba jut a részecske.

A berendezésben azonban benne van az összes lehetséges kimenet lehetősége, ezért a berendezést az összes lehetséges kimenethez tartozó projektorok $|u_i\rangle\langle u_i|$ halmazával célszerű jellemezni. Ezen kívül az egyes kimenetekhez tartozóan valamilyen fizikai mennyiség értéke más és más, pl. a spin z komponense, vagy a spin x komponense, vagy egy részecske koordinátája stb. A berendezést jellemző matematikai objektumba ezt is belefoglaljuk úgy, hogy a megfelelő projektort megszorozzuk a mért fizikai mennyiség adott kimenetéhez tartozó megfelelő α_i sajátértékkel és az egész apparátust egy

$$A = \sum_i \alpha_i |u_i\rangle\langle u_i| \quad (19.1)$$

operátorral írjuk le, amelyben az összeg az összes lehetséges kimenetet tartalmazza. A diszkrét összeg azt jelzi, hogy itt most diszkrét kimenetelekről lehet szó, mint a spin esetében, de később tárgyalni fogjuk azt az esetet is amikor az eredmények folytonosak.

Ha a bejövő részecske éppen valamilyen sajátállapotban van, ami azt jelenti, hogy azt már egy *azonos* berendezéssel preparáltuk, akkor A hatása erre az állapotra saját maga egy számszorosa. Valóban, ha a bejövő részecske állapota $|u_k\rangle$ akkor

$$A |u_k\rangle = \sum_i \alpha_i |u_i\rangle\langle u_i|u_k\rangle = \alpha_k |u_k\rangle, \quad (19.2)$$

azaz

$$A |u_k\rangle = \alpha_k |u_k\rangle \quad (19.3)$$

az eredmény. Ebben a bázisban egyszerűen láthatóan az A operátor mátrixa diagonális, és ha a mért α_i értékek valósak, akkor (18.25) és (18.20) alapján látható, hogy az operátor önadjungált.

Általában azonban közvetlenül nem tudjuk, hogy melyik a sajátállapotok bázisa, mert az operátor nem a fönti alakban, hanem rendszerint egy másik bázisban van megadva. Alapvető feladat tehát, hogy megkeressük azokat az állapotokat, amelyek egy önadjungált operátor sajátállapotai, és megadjuk azt is, hogy mik a megfelelő sajátértékek. Ha ezt tudjuk, akkor meg tudjuk mondani, hogy mekkorák lesznek egy tetszőleges bejövő állapothoz tartozó kimenő amplitúdók, és ezekhez milyen számszerű eredmények tartoznak. Az utóbbiak lesznek a megfelelő sajátértékek. Pl. egy z irányú Stern-Gerlachból kijövő $+z$ állapotú részecskét egy x irányúba, vagy egy tetszőleges irányúba engedve milyen amplitúdókkal kerül az a második berendezés egyes sajátállapotaiba. (Az egyik

leggyakoribb kvantummechanikai feladat, amit később sok speciális esetre fogunk tárgyalni az az, hogy energiamérés után milyen amplitúdóval kerül egy részecske a tér egy adott helyére.)

Az alábbiakban be fogjuk bizonyítani, hogy *n* dimenziós térben minden önadjungált operátornak létezik *n* db páronként ortogonális sajátvektora, azaz létezik olyan ortogonális bázis, amelyet az adott önadjungált operátor sajátvektorai alkotnak. A tétel alkalmas általánosításokkal kiterjeszthető a végtelen dimenziós tér önadjungált operátoraira is.

Invariáns alterek: A \mathfrak{H} tér \mathfrak{H}_1 alterét az A operátor invariáns alterének nevezzük, ha bármely $|\psi\rangle \in \mathfrak{H}_1$ esetén $A|\psi\rangle$ is \mathfrak{H}_1 -ben van, azaz A nem visz ki \mathfrak{H}_1 -ből.

Legyen \mathfrak{H}_1 egy egydimenziós altér, amelyet a $|\varphi\rangle$ vektor generál, azaz az összes $c|\varphi\rangle$ alakú vektorok altere, ahol c végigfut az összes komplex számon. Az A operátor linearitása miatt világos, hogy ahhoz, hogy a \mathfrak{H}_1 invariáns legyen szükséges és elegendő, hogy $A|\varphi\rangle$ is \mathfrak{H}_1 -ben legyen, azaz $A|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$ valamilyen λ , általában komplex számmal.

Sajátvektorok: Azt a nem zéró $|\varphi\rangle \neq \emptyset$ vektort, amelyre $A|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$, az A operátor sajátvektorának, a λ számot pedig A sajátértékének nevezzük. Így ha $|\varphi\rangle$ sajátvektor, akkor a $c|\varphi\rangle$ vektorok egydimenziós invariáns alteret alkotnak.

Tétel: Véges dimenziós térben minden A lineáris (nem föltétlenül önadjungált) operátornak van legalább egy sajátvektora.

Bizonyítás: Vegyünk föl a térben egy tetszőleges $|v_i\rangle$ ortonormált bázist, és tekintsük a keresett $|\varphi\rangle$ vektor kifejtését ebben a bázisban: $|\varphi\rangle = \sum_i c_i |v_i\rangle$, ahol $c_i = \langle v_i | \varphi \rangle$. Ahhoz, hogy $|\varphi\rangle$ sajátvektor legyen, fönn kell állnia az $A|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$ összefüggésnek. Szorozzuk a kifejtést skalárisan balról $\langle v_j |$ -vel

$$\langle v_j | A | \varphi \rangle = \sum_i \langle v_j | A | v_i \rangle c_i = \langle v_j | \lambda | \varphi \rangle = \lambda c_j, \quad (19.4)$$

$$\text{azaz} \quad \sum_i (a_{ji} - \lambda \delta_{ji}) c_j = 0. \quad (19.5)$$

Annak szükséges és elegendő föltétele, hogy a fönti homogén és lineáris egyenletrendszernek az ismeretlen c_j számokra nemtriviális (nem csupa 0) megoldása legyen, az, hogy az egyenlet mátrixának determinánsa tűnjön el:

$$\det |a_{ji} - \lambda \delta_{ji}| = 0. \quad (19.6)$$

A determináns a λ -ban egy n -ed fokú polinom lesz, amelynek mindig van legalább egy gyöke a komplex számok körében. Megkeresve ezt a λ_0 gyököt, majd megoldva az egyenletet a λ_0 -nak megfelelő c_i^0 számokra megkapjuk a $|\varphi\rangle$ sajátvektort mint a $|v_i\rangle$ bázisvektorok lineáris kombinációját. Itt nem használtuk ki, hogy A önadjungált. A fönti (19.5) egyenlet neve *karakterisztikus* vagy *szekuláris egyenlet*.

Most rátérünk az önadjungált operátorokra.

Tétel: Önadjungált operátor sajátértékei valósak.

Bizonyítás:

$$\begin{aligned} A|\varphi\rangle &= \lambda|\varphi\rangle, & \lambda\langle\varphi|\varphi\rangle &= \langle\varphi|A\varphi\rangle = \langle A\varphi|\varphi\rangle = \lambda^*\langle\varphi|\varphi\rangle \\ &\Rightarrow (\lambda - \lambda^*)\langle\varphi|\varphi\rangle = 0 \Rightarrow \lambda = \lambda^*, & \text{mert } \langle\varphi|\varphi\rangle &\neq 0. \end{aligned}$$

Tétel: Önadjungált operátor különböző sajátértékeihez tartozó sajátvektorok ortogonálisak.

Bizonyítás:

$$\begin{aligned} A|\varphi_1\rangle &= \lambda_1|\varphi_1\rangle, & A|\varphi_2\rangle &= \lambda_2|\varphi_2\rangle, & \lambda_1 &\neq \lambda_2 & \text{valósak} \\ \lambda_1\langle\varphi_2|\varphi_1\rangle &= \langle\varphi_2|A\varphi_1\rangle = \langle A\varphi_2|\varphi_1\rangle = \lambda_2\langle\varphi_2|\varphi_1\rangle \\ &\Rightarrow (\lambda_1 - \lambda_2)\langle\varphi_2|\varphi_1\rangle = 0 \Rightarrow \langle\varphi_2|\varphi_1\rangle = 0. \end{aligned}$$

Spektráltétel: n dimenziós térben egy önadjungált operátornak van n darab egymásra páronként merőleges sajátvektora.

Egy adott sajátértékhez tartozó sajátvektorok a zéró vektort hozzávéve alteret alkotnak. Ez az alter invariáns altere az A operátornak, azaz nem visz ki belőle. A spektráltétel bizonyításánál azt használjuk ki, hogy önadjungált operátor esetén egy adott sajátvektorra merőleges ortogonális vektorok halmaza is invariáns alter.

Bizonyítás: Az előzőek szerint mindig van legalább egy sajátvektor $|u_1\rangle$: legyen $A|u_1\rangle = \alpha_1|u_1\rangle$. Az $|u_1\rangle$ -re merőleges vektorok egy $n-1$ dimenziós \mathfrak{H}_1 alteret alkotnak. Megmutatjuk, hogy \mathfrak{H}_1 invariáns altere A -nak. Legyen $|\psi\rangle \in \mathfrak{H}_1$, azaz $\langle\psi|u_1\rangle = 0$, akkor $\langle A\psi|u_1\rangle = \langle\psi|Au_1\rangle = \alpha_1\langle\psi|u_1\rangle = 0$, tehát $A|\psi\rangle$ is merőleges $|u_1\rangle$ -re, azaz benne van \mathfrak{H}_1 -ben, tehát \mathfrak{H}_1 invariáns altere A -nak. Tekinthetjük emiatt A -t a \mathfrak{H}_1 -ben. Itt ismét létezik legalább egy sajátvektor $|u_2\rangle$. Tekintsük most \mathfrak{H}_1 azon \mathfrak{H}_2 alterét amely az u_2 -re merőleges vektorokból áll. Mivel ez \mathfrak{H}_1 altere az itteni vektorok $|u_1\rangle$ -re is merőlegesek lesznek. A fönti gondolatmenetet ismételve kapunk egy $|u_3\rangle$ sajátvektort, stb. Az eljárást folytatva végül szükségképpen kapunk egy $|u_n\rangle$ sajátvektort, amely az összes előzőre merőleges. Ilyen módon páronként ortogonális $|u_i\rangle$ vektorok halmazát kapjuk. Mivel egy sajátvektor számszorosa ugyanahhoz a sajátértékhez tartozó sajátvektor, az $|u_i\rangle$ -k normálhatók is \square .

Az A önadjungált operátor mátrixa ebben az $|u_i\rangle$ bázisban az

$$a_{ik} = \langle u_i|Au_k\rangle = \alpha_k\langle u_i|u_k\rangle = \alpha_k\delta_{ik} \quad (19.7)$$

összefüggés miatt diagonális, tehát csak a főátlóban vannak nem nulla elemek, és ezek éppen a sajátértékek. Ennek megfelelően a (19.7) összefüggés alapján az A operátor alakja a következő:

$$A = \sum_k \alpha_k |u_k\rangle\langle u_k| = \sum_k \alpha_k E_k, \quad (19.8)$$

ahol $E_k = |u_k\rangle\langle u_k|$ az $|u_k\rangle$ sajátvektorra vetítő projekció. Ezt a formulát az A spektrális fölbontásának nevezzük, a sajátértékek összességét pedig az A önadjungált operátor *spektrumának*, amely szükségképpen valós számokból áll.

Előfordulhat, hogy több különböző ortogonális sajátvektor ugyanahhoz a sajátértékhez tartozik. Ha az adott α_k sajátértékhez tartozó különböző ortogonális vektorok száma $g_k > 1$, akkor azt mondjuk, hogy a sajátérték g_k -szoros, vagy g_k -szorosan *elfajult* vagy *degenerált*. Világos, hogy egy adott α_k -hoz tartozó ortogonális vektorok minden lineáris kombinációja is ugyanehhez a sajátértékhez tartozó sajátvektor, ezek tehát egy g_k dimenziós alteret alkotnak, amelyen belül bármely ortogonális bázis az A sajátvektorainak részhalmaza. Emiatt ha A sajátértékei között van többszörösen degenerált, akkor az egymásra ortogonális sajátvektorok halmaza nem egyértelmű.

Sajátrepresentációban, azaz abban a bázisban, amely az önadjungált operátor sajátvektoraiból áll, az operátor mátrixa diagonális és az átlóban éppen a sajátértékek állnak. A sajátrepresentációban fölírt karakterisztikus polinomból látszik, hogy az α_k sajátérték a karakterisztikus polinom g_k -szoros gyöke.

19.1 Feladat: Bizonyítsuk be, hogy egy A lineáris operátor képe (az operátor értékkészlete) és magja (azok a vektorok, amelyeket az A a nullába képez) alterek a \mathfrak{H} -ban, méghozzá az A invariáns alterei.

19.2 Feladat: Mutassuk meg, hogy egy n dimenziós térben a magtér és a képtér dimenziószámának összege kiadja az egész tér dimenziószámát.

19.3 Feladat: Mutassuk meg, hogy egy projekciós operátor sajátértéke csak 0 vagy 1 lehet.

19.4 Feladat: Pozitívnak nevezünk egy A önadjungált operátort, ha tetszőleges $|\varphi\rangle$ -re $\langle\varphi|A|\varphi\rangle \geq 0$. Pozitív definit az operátor, ha $|\varphi\rangle \neq 0$ -ra $\langle\varphi|A|\varphi\rangle > 0$.

Mutassuk meg, hogy $A^\dagger A$ tetszőleges lineáris A esetén pozitív önadjungált operátor.

19.5 Feladat: Mutassuk meg, hogy unitér operátorok sajátértékei egységnyi abszolút értékű komplex számok.

19.6 Feladat: Mutassuk meg, hogy véges dimenziós térben minden unitér operátor diagonalizálható,

azaz létezik a tér dimenziószámával megegyező számú páronként ortogonális egységvektora.

20. Fölcserélhető operátorok, CSCO

20.1. Fölcserélhető operátorok sajátvektorairól

Mint korábban is jeleztük, két operátor általában nem fölcserélhető, azaz $AB \neq BA$. Ha viszont két operátor fölcserélhető, akkor érvényes a következő igen fontos tétel: *Ha A és B fölcserélhető önadjungált lineáris operátorok, akkor van olyan ortonormált bázis, amely mindkét operátor sajátvektoraiból áll, azaz van közös sajátvektorrendszerük, így egyszerre diagonalizálhatók.*

Bizonyítás: Legyen $|\varphi\rangle$ az A sajátvektora α_1 sajátértékkel: $A|\varphi\rangle = \alpha_1|\varphi\rangle$. Ekkor

$$AB|\varphi\rangle = BA|\varphi\rangle = B\alpha_1|\varphi\rangle = \alpha_1B|\varphi\rangle. \quad (20.1)$$

Azaz $B|\varphi\rangle$ is az α_1 sajátértékhez tartozik.

(i) Ha α_1 nem degenerált, azaz a hozzátartozó invariáns altér egydimenziós, akkor a két – ugyanehhez az α_1 -hez tartozó – sajátvektor $|\varphi\rangle$ és $B|\varphi\rangle$ csak egy konstansszorosban különbözhet egymástól:

$$B|\varphi\rangle = \beta_1|\varphi\rangle, \quad (20.2)$$

ami azt jelenti, hogy $|\varphi\rangle$ a B -nek is sajátvektora. Legyen ebben az esetben $|u_1\rangle := |\varphi\rangle$.

(ii) Ha α_1 degenerált, akkor annyit mondhatunk, hogy minden az α_1 -hez tartozó $|\varphi\rangle$ -vel együtt $B|\varphi\rangle$ is benne van A -nak az α_1 -hez tartozó invariáns alterében, azaz B nem visz ki ebből az alterből, más szóval ez az altér B -nek is invariáns altere. Emiatt megszoríthatjuk B -t erre az alterre, és lévén B önadjungált, létezik olyan egymásra páronként ortogonális vektorrendszer, amelyek B -nek sajátvektorai ebben az alterben. Mivel minden ittlévő vektor A -nak is sajátvektora α_1 sajátértékkel, a kapott vektorok A és B közös sajátvektorai.

Ha most az előbb jelzett egy vagy többdimenziós alterre ortogonális kiegészítő teret vesszük, az ismét invariáns altere lesz A -nak és B -nek, ez következik A és B önadjungált voltából, ahogyan azt a spektráltételnél használt érvelésből láttuk. Ebben az alterben megismételjük az előző megfontolást, és azt addig folytatjuk, amíg a véges dimenziósnak tekintett teljes térben az ortogonális kiegészítő terek el nem fogynak. Az eljárást kezdetjük fordítva is, először B nemdegenerált vagy degenerált sajátértékeivel, akkor általában más egymást követő egyre kisebb dimenziós altérrendszert kapunk, de a tétel természetesen érvényes. Hozzáteesszük, hogy a tétel általánosítható végtelen dimenziós terekre illetve nemkorlátos operátorokra is, de a föltételeket finomítani kell, és a bizonyítás sokkal bonyolultabb.

Fölhívjuk a figyelmet arra, hogy a tétel azt mondja, hogy $[A, B] = 0$ esetén *létezik* közös sajátvektorrendszer, de nincs szó arról, hogy az egyik operátor valamely sajátvektora automatikusan a másik operátor sajátvektora is lenne. Pl. az I egységoperátornak minden nem zéró vektor nyilvánvalóan a sajátvektora 1 sajátértékkel. Ugyanakkor az is világos, hogy I minden más lineáris operátorral fölcserélhető. Ebből azonban nem következik, hogy tetszőleges operátornak is minden nem zéró vektor sajátvektora lenne.

20.2. Fölcserélhető operátorok teljes rendszere: CSCO

Itt az előző alszakaszban részben már jelzett kérdést vizsgáljuk, hogy mikor egyértelmű két vagy több egymással fölcserélhető operátor közös sajátvektorrendszere.

Az A, B, C, \dots operátorok halmazát CSCO-nak (Complete Set of Commuting Operators) nevezzük,

(i) ha páronként fölcserélhetők és

(ii) ha megadjuk a sajátértékeiket, akkor azok egyértelműen (egy konstans szorzó erejéig) meghatározzák a közös sajátvektoraikat. Más szóval létezik egy egyértelműen meghatározott ortonormált bázis, amelyben a CSCO minden operátora diagonális.

Ha A és B CSCO-t alkot, akkor hozzávehetünk még olyan C -t, amely mind A -val mind B -vel kommutál, s ez továbbra is CSCO lesz, de általában olyan esetben szoktunk CSCO-ról beszélni, ha az operátorok halmaza maximális abban az értelemben, hogy közülük bármelyiket elhagyva a maradék már nem CSCO.

Megjegyezzük még, hogy ha A, B és C CSCO-t alkot és a sajátértékek $\alpha_k, \beta_l, \gamma_m$, akkor a megfelelő sajátvektorokat $|\alpha_k, \beta_l, \gamma_m\rangle$ -el is szokás jelölni, amelyek egyértelműen meg vannak határozva.

20.1 Feladat: Mutassuk meg, hogy tetszőleges A lineáris operátor fölbontható $A = B + iC$ alakba, ahol B és C önadjungált operátorok.

20.2 Feladat: Normálisnak nevezünk egy operátort, ha fölcserélhető az adjungáltjával. Mutassuk meg az előző feladat alapján, hogy minden normális operátor diagonalizálható.

20.3 Feladat: A 20.1 Feladatban megmutatott fölbontás nélkül, az önadjungált operátorokra vonatkozó spektráltétel gondolatmenetének alkalmas módosításával mutassuk meg, hogy minden normális operátor diagonalizálható.

20.4 Feladat: Mutassuk meg, hogy ha egy operátornak létezik a tér dimenziószámával megegyező számú egymásra páronként ortogonális sajátvektora, akkor az az operátor szükségképpen normális.

20.5 Feladat: Mutassuk meg, hogy ha az A és B fölcserélhető önadjungált operátor, továbbá $|\varphi_1\rangle$ és $|\varphi_2\rangle$ az A két különböző sajátértékéhez tartozó sajátvektora, akkor a $\langle\varphi_1|B|\varphi_2\rangle$ mátrixelem eltűnik.

21. A négyzetesen integrálható függvények tere, és az L^2 -höz nem tartozó bázisok

21.1. Az L^2 tér definíciója

L^2 térnek nevezzük azoknak a $\psi(x)$ valós változós komplex értékű függvényeknek a halmazát, amelyek valamely intervallumon – ez lehet a $(-\infty, \infty)$ is – négyzetesen integrálhatóak, azaz amelyekre a

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx \quad (21.1)$$

integrál létezik.

Megjegyezzük, hogy itt az integrálás szigorúan a Lebesgue-féle értelemben értendő [Riesz, SzNagy], tehát két függvény között, amelyek csak egy nulla mértékű halmazon térnek el egymástól nem tesszünk különbséget.

Az L^2 nyilván lineáris tér a függvények szokásos összeadására, illetve komplex számmal való szorzására nézve. Ezen a téren a belső szorzat, amelyet itt egyelőre $(\varphi(x), \psi(x))$ -ként írunk az alábbi határozott integrállal értelmezhető:

$$(\varphi(x), \psi(x)) := \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x)\psi(x)dx, \quad (21.2)$$

jelen esetben a $(-\infty, \infty)$ intervallumra.

21.1 Feladat: Mutassuk meg, hogy a fenti (21.2) definíció teljesíti a belső szorzat 18. szakaszban előírt tulajdonságait.

Meg lehet mutatni, hogy az L^2 téren létezik diszkrét bázis, azaz olyan megszámlálható $u_k(x)$, ($k = 1, 2, \dots$), függvényrendszer, amelynek segítségével *tetszőleges* négyzetesen integrálható függvény kifejthető a

$$\psi(x) = \sum_k c_k u_k(x) \quad (21.3)$$

formula szerint. Az ilyen tulajdonságú $u_k(x)$ függvényrendszert *teljesnek* szokás nevezni. (Megjegyezzük, hogy az egyenlőség itt ismét az L^2 értelemben értendő, lásd az említett matematikai könyvet.) Az $u_k(x)$ függvényrendszer *ortogonális és normált*, ha az

$$\int u_k^*(x) u_{k'}(x) dx = \delta_{kk'} \quad (21.4)$$

összefüggés teljesül. Az alábbiakban mindig ilyen tulajdonságú bázisról lesz szó. A teljesség tehát azt jelenti, hogy tetszőleges $\psi(x)$ kifejthető az $u_k(x)$ -ek szerint. A (21.3) kifejtést $u_{k'}^*(x)$ -el szorozva, és kihasználva az (21.4) ortonormalitási feltételt kapjuk, hogy

$$c_k = \int u_k^*(x) \psi(x) dx. \quad (21.5)$$

(Itt az integrálás és a végtelen összegzés fölcserélhető, ami a Lebesgue-integrál fontos tulajdonsága). Az utóbbi két összefüggés alapján írhatjuk, hogy:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_k c_k u_k(x) = \sum_k \left(\int u_k^*(x') \psi(x') dx' \right) u_k(x) = \\ &= \int \left(\sum_k u_k^*(x') u_k(x) \right) \psi(x') dx'. \end{aligned} \quad (21.6)$$

Mivel ez minden $\psi(x)$ -re fönnáll (teljesség), így

$$\sum_k u_k^*(x') u_k(x) = \delta(x - x'), \quad (21.7)$$

s ez utóbbit is szokták a teljesség kifejezésének tekinteni.

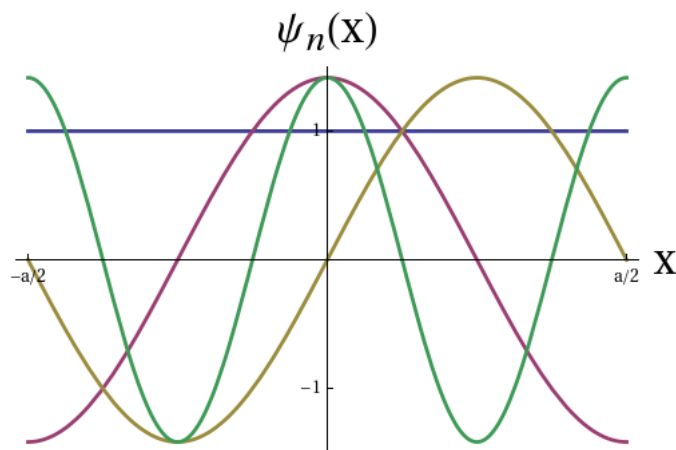
Példák:

1. Fourier-rendszer a $(-a/2, a/2)$ intervallumon értelmezett periodikus függvények terén:

$$\frac{1}{\sqrt{a}}, \quad \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{2\pi}{a} nx\right), \quad \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi}{a} nx\right), \quad n = 1, 2, \dots \quad (21.8)$$

vagy komplex változatban

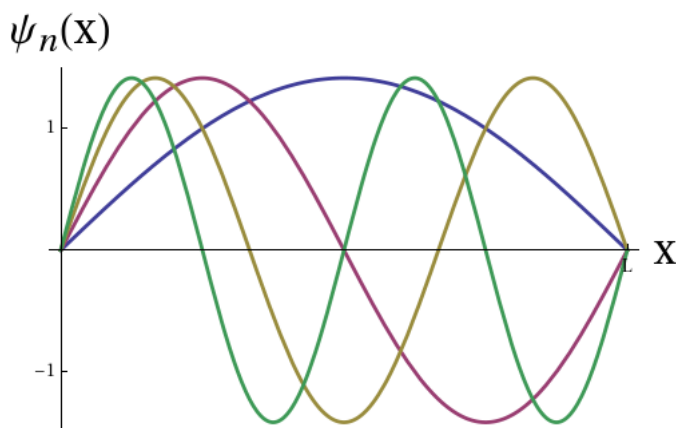
$$\frac{1}{\sqrt{a}} e^{i \frac{2\pi}{a} nx}, \quad n = 0, 1, \dots \quad (21.9)$$



3. ábra. A Fourier-rendszer első néhány függvényének grafikonja

2. A szinusz-rendszer a 0-ban és az L -ben eltűnő függvények terén:

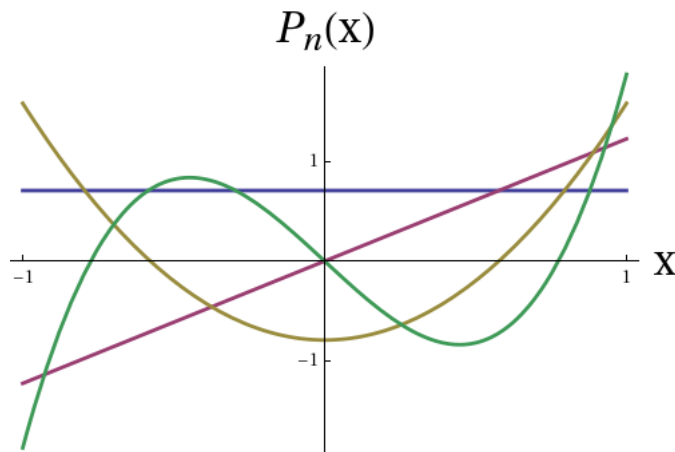
$$\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}nx\right) \quad (21.10)$$



4. ábra. A szinusz-rendszer első néhány függvényének grafikonja

3. A $P_l(x)$ Legendre-polinomok a $[-1, +1]$ intervallumon értelmezett négyzetesen integrálható függvények terén, melyeket az $1, x, x^2, x^3 \dots$ rendszer ortogonalizálásával kapunk:

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = (3x^2 - 1)/2, \quad (21.11)$$



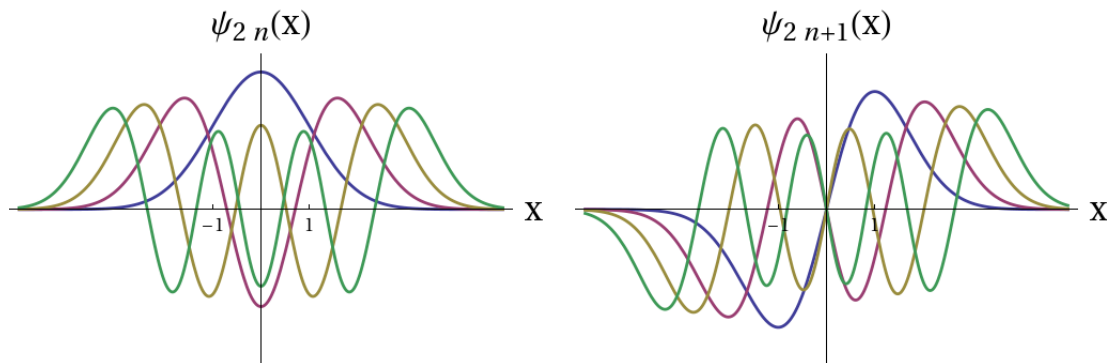
5. ábra. Az első néhány Legendre-polinom grafikonja

21.2 Feladat: Normáljuk az itt megadott Legendre-polinomokat, mutassuk meg, hogy ez a három ortogonális és keressük meg a harmad- és negyedrendű polinomot.

4. A Hermite-függvények:

$$\mathcal{N}_n e^{-x^2/2} H_n(x) \quad (21.12)$$

a $(-\infty, \infty)$ intervallumon, ahol $H_n(x)$ -ek az n -ed fokú polinomok, az úgynevezett Hermite-féle polinomok melyek közül az első három: $H_0(x) = 1$, $H_1(x) = 2x$, $H_2(x) = 4x^2 - 2$, és \mathcal{N}_n -ek alkalmasan választott normálási tényezők.



6. ábra. Az első néhány páros illetve páratlan indexű Hermite-függvény grafikonja

Megjegyezzük, hogy a fenti példák mindegyike egyben a kvantummechanikában előforduló fontos differenciáloperátorok sajátfüggvényei is.

Lineáris operátorok az L^2 -n : pl. paritás egydimenzióban, a változóval való szorzás, a deriválás. A későbbiek szempontjából lényeges lesz, hogy a változóval való szorzás és a deriválás nem cserélhető föl.

21.3 Feladat: Mutassuk meg, hogy a paritás a fent (21.2) bevezetett integrállal értelmezett belső szorzatra nézve önadjungált és unitér.

21.4 Feladat: Mutassuk meg, hogy valós változós komplex függvényt a változóval szorozva önadjungált operátort adtunk meg.

21.5 Feladat: Igazoljuk, hogy a valós változós komplex függvények terén a deriválás viszont nem önadjungált operátor.

21.2. Az L^2 -höz nem tartozó, általánosított bázisok

21.2.1. Síkhullámok

Láttuk a korábbiakban, hogy a de Broglie által bevezetett p impulzusú állapotokhoz tartozó hullámfüggvények nem négyzetesen integrálhatóak, de belőlük egy folytonos szuperpozícióval ilyenek építhetők föl. Egy dimenzióban :

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} dp, \quad (21.13)$$

ahol mint a Fourier-transzformációk elméletéből tudjuk (Parseval-Plancherel-féle tétel):

$$\tilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} dx. \quad (21.14)$$

Jelöljük az itt szereplő de Broglie-féle (nulla időpillanatban vett) síkhullámot $v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$ -vel. Mint már volt szó róla, a $|v_p(x)|^2 = \frac{1}{2\pi}$ függvény nem integrálható a teljes $(-\infty, \infty)$ intervallumon. A fönti (21.13) integrált úgy tekintjük, mint egy kifejtést a $v_p(x)$ függvények szerint. Két ilyen bázisfüggvény skaláris szorzata a Dirac-delta ismert tulajdonsága (Fourier-előállítás) alapján a következő:

$$\int_{-\infty}^{\infty} v_p^*(x) v_{p'}(x) dx = \delta(p - p'), \quad (21.15)$$

amely egy "általánosított ortogonalitási reláció". A Fourier-transzformált és az inverze is létezik, ha $\psi(x)$ négyzetesen integrálható, és ha a

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) v_p(x) dp, \quad (21.16)$$

illetve a $\tilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} v_p^*(x) \psi(x) dx$ formában írjuk ezeket, akkor látható, hogy ezek hasonlóak az L^2 -beli diszkrét bázisok szerinti kifejtésekhez, és a teljesség a következőképpen írható:

$$\int_{-\infty}^{\infty} v_p(x') v_p^*(x) dx = \delta(x - x'). \quad (21.17)$$

A p folytonos paraméter által indexelt $v_p(x)$ függvények halmazát ezért *általánosított bázis*nak tekinthetjük, a bázis elemei a p paraméter értékében különböznek egymástól.

Három dimenzióban ezek a formulák hasonlóak, ott $v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}$.

21.2.2. Delta-függvények

Egy hasonló folytonos paraméterrel illetve paraméterekkel indexelhető általánosított bázist nyerhetünk, ha tekintjük a következő azonosságokat a háromdimenziós térben mozgó részecskét leíró

hullámfüggvényekre vonatkozóan. Legyen $\psi(\mathbf{r})$ egy négyzetesen integrálható függvény, ekkor a $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ Dirac-delta definíciója szerint, nyilvánvalóan fennáll:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\mathbf{r}_0) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) d^3\mathbf{r}_0, \quad (21.18)$$

$$\psi(\mathbf{r}_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) d^3\mathbf{r}. \quad (21.19)$$

Az első formula ezek közül úgy interpretálható, hogy a $\psi(\mathbf{r})$ függvényt kifejtettük a $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ általánosított bázisvektorok szerint, amelyeket az \mathbf{r}_0 folytonos paraméter indexel, és a $\psi(\mathbf{r}_0)$ kifejtési együtthatók egybe esnek a kérdéses függvény értékeivel az \mathbf{r}_0 helyeken. A második formulát az elsőből megkaphatjuk úgy is, hogy az első megszorozzuk a $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_0)$ komplex konjugáltjával, amely valós lévén megegyezik önmagával, és kihasználjuk az

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_0) d^3\mathbf{r} = \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}'_0) \quad (21.20)$$

általánosított "ortogonalitási relációt".

21.2.3. Egyéb általánosított bázisok

A kvantummechanikában előfordul az az eset is, amikor egy négyzetesen integrálható hullámfüggvényt egy – a fentiektől különböző – az L^2 -be nem tartozó általánosított bázisvektoroknak tekinthető $w_\alpha(\mathbf{r})$ függvényeken fejtünk ki a $c(\alpha)$ függvényekkel, mint kifejtési együtthatókkal:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} c(\alpha) w_\alpha(\mathbf{r}) d\alpha, \quad (21.21)$$

ahol a $w_\alpha(\mathbf{r})$ -ek a következő tulajdonságúak:

$$\int_{-\infty}^{\infty} w_\alpha^*(\mathbf{r}) w_{\alpha'}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \delta(\alpha - \alpha'). \quad (21.22)$$

22. A koordináta és az impulzus operátora, általánosított sajátvektorok

Ha az A fizikai mennyiség spektruma diszkrét és a lehetséges mérési kimenetek az α_i eredményeket adják, akkor az $A = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$ operátornak megfelelő berendezésen való áthaladás (fizikai mennyiség mérése) során az egyes kimenetek valószínűségi amplitúdóit a $|\psi\rangle = \sum_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|\psi\rangle$ kifejtésnek megfelelő $\langle \varphi_i|\psi\rangle$ számok adják. A fizikai mennyiségek között azonban a kvantumelméletben is vannak olyanok, amelyek folytonos értékeket vehetnek föl. Ilyen pl. a koordináta, amelynek most csak egyik derékszögű komponensét vizsgáljuk. Legyen ez x . Jelöljük $\langle x|\psi\rangle$ -vel annak a valószínűségi amplitúdóját, hogy a részecskét a mérés után az x helyen találjuk. Ezeket az $\langle x|\psi\rangle$ komplex számokat az összes lehetséges x -re tekintve, az x egy komplex függvényét kapjuk, amelyet $\langle x|\psi\rangle \equiv \psi(x)$ -szel szokás jelölni. Dirac nyomán az $|x\rangle$ -et is szoktuk (általánosított) állapotnak nevezni, noha ez szigorúbb értelemben nem az, amint az alább kiviláglik. Föltételezésünk szerint ezek az $|x\rangle$ állapotok azt írják le, hogy a részecske az x helyen van. Mivel ezek az x -ek bármilyen valós számok lehetnek, az $|x\rangle$ állapotok kontinuum számosságúak. Föltételezzük, hogy ezek egy

teljes rendszert alkotnak általánosított értelemben, azaz segítségükkel bármely állapot kifejezhető folytonos módon:

$$|\psi\rangle = \int |x\rangle \langle x|\psi\rangle dx. \quad (22.1)$$

Egy diszkrét sajátértékekkel bíró $A = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$ spektrálfölbontású operátor analogonjára bevezetjük az X helykoordináta operátort, amelynek az általánosított spektrális előállítása

$$X = \int x |x\rangle \langle x| dx \quad (22.2)$$

alakú.

Ennek általánosított sajátvektorai az $|x\rangle$ -ek, amelyekkel a (22.1) föltételezés alapján minden közönséges $|\psi\rangle$ állapot kifejezhető. Valóban, ha (22.1)-et balról formálisan megszorozzuk az $\langle x'|$ -vel, akkor az $\langle x'|\psi\rangle = \int \langle x'|x\rangle \langle x|\psi\rangle dx$ összefüggést nyerjük, vagyis a $\psi(x') = \int \langle x'|x\rangle \psi(x) dx$ integrális kapcsolatot. Látható, hogy ha kikötjük, hogy ez minden x' -re érvényes maradjon, akkor az $\langle x'|x\rangle$ belső szorzatra a $\delta(x-x')$ adódik, ami mutatja, hogy ezek a koordináta sajátállapotok a közönséges értelemben nem normálhatók.

A belső szorzatot ebben a reprezentációban

$$\langle \varphi|\psi\rangle = \int \langle \varphi|x\rangle \langle x|\psi\rangle dx = \int \varphi^*(x) \psi(x) dx, \quad (22.3)$$

azaz a két függvény szorzatának integráljaként lehet fölírni, ami valóban megfelel az L^2 térben vett belső szorzatnak, ha $\psi(x)$ és $\varphi(x)$ normálható függvények. Az X operátor hatása koordinátareprezentációban a következő:

$$\langle x|X|\psi\rangle = \int x' \langle x|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle dx' = \int x' \delta(x-x') \psi(x') dx' = x\psi(x), \quad (22.4)$$

amit néha így is fogunk írni:

$$\hat{X}\psi(x) = x\psi(x). \quad (22.5)$$

Az \hat{X} jelölés a kalappal az X operátor koordinátareprezentációban való hatására utal.

Hasonlóan be lehet vezetni az impulzus-sajátállapotokat is, mint a

$$P = \int p |p\rangle \langle p| dp \quad (22.6)$$

operátor sajátállapotait. A

$$|\psi\rangle = \int |p\rangle \langle p|\psi\rangle dp = \int |p\rangle \tilde{\psi}(p) dp \quad (22.7)$$

kifejtésből:

$$\psi(x) \equiv \langle x|\psi\rangle = \int \langle x|p\rangle \langle p|\psi\rangle dp = \int \langle x|p\rangle \tilde{\psi}(p) dp, \quad (22.8)$$

amiből (21.13) szerint:

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}. \quad (22.9)$$

Valóban, de Broglie nyomán, mint a történeti részből tudjuk, annak az amplitúdóját, hogy egy p impulzusú részecskét az x helyen találunk az időtől függő $e^{-iEt/\hbar}$ fázisszorzó erejéig éppen a (22.9) által megadott képlet adja. Ebből következik – de a $\langle p|\psi\rangle = \int \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle dx$ ből is látható – hogy

$$\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar}. \quad (22.10)$$

Eszerint a $|\psi\rangle$ állapot koordináta- és impulzusreprezentációban vett alakja között a következő kapcsolat van:

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p | \psi \rangle = \int \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx, \quad (22.11)$$

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle = \int \langle x | p \rangle \langle p | \psi \rangle dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{ipx/\hbar} \tilde{\psi}(p) dp. \quad (22.12)$$

Vagyis látható, hogy a koordinátareprezentációban vett hullámfüggvény az impulzusreprezentációban vett hullámfüggvény Fourier-transzformáltja és fordítva, amit már korábban is láttunk, vagyis a szokásos Fourier-transzformációs képletek úgy is tekinthetők, mint a reprezentáció-transzformáció speciális esete.

Az impulzus operátora koordinátareprezentációban:

$$\begin{aligned} \langle x | P | \psi \rangle &= \int \langle x | P | p \rangle \langle p | \psi \rangle dp = \int p \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \tilde{\psi}(p) dp = \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \tilde{\psi}(p) dp = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) =: \hat{P}\psi(x). \end{aligned} \quad (22.13)$$

Általában háromdimenziós esetben:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{P} | \psi \rangle = -i\hbar \nabla \psi(\mathbf{r}). \quad (22.14)$$

Egyszerűen bizonyíthatóan X és P önadjungált operátorok.

Most megkeressük X és P sajátfüggvényeit koordinátareprezentációban. Keressük először tehát azt a $\psi_a(x)$ függvényt amelyre

$$\hat{X}\psi_a(x) = x\psi_a(x) = a\psi_a(x) \quad (22.15)$$

minden x -re:

$$(x - a)\psi_a(x) = 0. \quad (22.16)$$

Ez minden x -re csak úgy állhat fenn, ha $\psi_a(x) = 0$ mindenhol ahol $x \neq a$, és nem föltétlenül 0, ahol $x = a$. Ha ott is nulla lenne, akkor $\psi_a(x)$ azonosan mindenütt 0 lenne, ezért előírjuk, hogy az $x = a$ -ban nem 0 hanem legyen ott a $\psi_a(x) = \langle x | a \rangle = \delta(x - a)$ -nak megfelelő "függvény", s így (22.16) mindenhol fönnáll. Az impulzus esetén a

$$\hat{P}\psi_p(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_p(x) = p\psi_p(x) \quad (22.17)$$

egyenlet megoldása

$$\psi_p(x) = C e^{ipx/\hbar}, \quad (22.18)$$

ahol a C integrációs állandót tetszőlegesen választhatjuk, s ha ez éppen $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ akkor látjuk, hogy $\psi_p(x) = v_p(x)$.

22.1. X és P nem fölcserélhető

X, Y, Z egymás közt fölcserélhető, hasonlóan P_x, P_y, P_z . Vizsgáljuk $(XP_x - P_xX) |\psi\rangle$ -t koordinátareprezentációban. Legyen $|\chi\rangle := P_x |\psi\rangle$ és $|\phi\rangle := X |\psi\rangle$, ekkor

$$\langle \mathbf{r} | \chi \rangle \equiv \chi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | P_x | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (22.19)$$

$$\langle \mathbf{r} | \phi \rangle \equiv \phi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | X | \psi \rangle = x\psi(\mathbf{r}), \quad (22.20)$$

így

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | (XP_x - P_xX) | \psi \rangle &= \langle \mathbf{r} | XP_x | \psi \rangle - \langle \mathbf{r} | P_xX | \psi \rangle = \langle \mathbf{r} | X | \chi \rangle - \langle \mathbf{r} | P_x | \phi \rangle = \\ &= x\chi(\mathbf{r}) + i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial x} = -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\psi(\mathbf{r})) = \\ &= i\hbar \psi(\mathbf{r}) = i\hbar \langle \mathbf{r} | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (22.21)$$

Ebből $(XP_x - P_xX)|\psi\rangle = i\hbar|\psi\rangle$ minden $|\psi\rangle$ -re (amelyre a kommutátor értelmezve van). Így

$$XP_x - P_xX \equiv [X, P_x] = i\hbar. \quad (22.22)$$

22.1 Feladat: Adjuk meg az X operátor hatását impulzus-reprezentációban.

22.2 Feladat: Teljes indukcióval bizonyítsuk, hogy $[X^n, P_x] = i\hbar nX^{n-1}$

22.3 Feladat: Az előző feladat alapján lássuk be, hogy $[f(X), P_x] = i\hbar \frac{d}{dx}f(X)$, ha $f(X)$ az X operátor elegendően síma függvénye.

23. A kvantummechanika posztulátumai

1. *A fizikai rendszer lehetséges (tiszta) állapotait egy alkalmasan választott Hilbert-tér, az állapottér $|\psi\rangle$ vektorai adják meg.*

Ebben benne van a szuperpozíció elve, hiszen a vektorok lineáris kombinációi is vektorok, tehát ezek is a fizikai rendszer lehetséges állapotai. A tiszta jelző itt arra utal, hogy az állapot a rendszerről lehetséges legtöbb információt tartalmazza, az állapotot már preparáltuk. A 2. szakaszban tárgyalt példa esetén pl. a foton már áthaladt egy polarizátoron és tudjuk, hogy ez után milyen a polarizációs állapota. Egy természetes, polarizálatlan forrásból érkező fotonok állapotáról nem tudunk mit mondani, azok polarizálatlanok, s így egy ilyen foton nincs tiszta állapotban, állapotát *keveréknek* nevezzük. A tiszta állapot elemzésére alább még visszatérünk, a keverék állapotok matematikai jellemzésével itt nem foglalkozunk.

2. *A fizikai mennyiségeknek az állapottéren értelmezett lineáris és önadjungált operátorok felelnek meg.*

Egy fizikai mennyiséget egy mérőberendezéssel állapítunk meg, az önadjungált operátorokra tehát úgy tekinthetünk, mint amelyek egy ilyen berendezés matematikai megfelelői. Egy fizikai mennyiséget ezért néha “megfigyelhető mennyiségnek” (observable) is szokás nevezni.

3. *Az A operátorral jellemzett fizikai mennyiség lehetséges mért értékei az operátor valamelyik α sajátértéke.*

Ezek a sajátértékek, mint tudjuk valós számok, és lehetnek diszkrétnek, azaz kvantáltak, de lehetnek folytonos változók is.

4. *Ha az A fizikai mennyiséget mérjük a normált $|\psi\rangle$ ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$) állapotban, akkor*

(i) *diszkrét spektrum esetén annak a valószínűsége, hogy az α_n sajátértéket kapjuk eredményül*

$$\mathcal{P}(\alpha_n) = \langle\psi|E_n|\psi\rangle, \quad (23.1)$$

ahol E_n az A operátor α_n sajátértékéhez tartozó sajátalterére vetítő projekciós operátor;

(ii) *folytonos spektrum esetén annak a valószínűsége, hogy a mért általánosított sajátérték α az (α_1, α_2) intervallumba esik*

$$\mathcal{P}(\alpha_1 < \alpha < \alpha_2) = \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \langle\psi|E_\alpha|\psi\rangle d\alpha, \quad (23.2)$$

ahol E_α az α általánosított sajátértékhez tartozó projekció.

A fenti kijelentéseket egy kissé másképpen is megfogalmazhatjuk. Tekintsük először a diszkrét spektrum esetét. Ha $|u_n^i\rangle$ az α_n sajátértékhez tartozó sajátalter egy ortonormált bázisa, azaz $A|u_n^i\rangle = \alpha_n|u_n^i\rangle$ ($i = 1, 2, \dots, g_n$), azaz az α_n sajátérték g_n -szeresen degenerált, akkor $E_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i|$, s így (23.1) szerint

$$\mathcal{P}(\alpha_n) = \langle\psi|E_n|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} \langle\psi|u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2. \quad (23.3)$$

Az $\langle u_n^i | \psi \rangle = c_n^i$ jelöléssel, amelyek a $|\psi\rangle$ állapot kifejtési együtthatói az altérben lévő bázisvektorok szerint

$$\mathcal{P}(\alpha_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2. \quad (23.4)$$

Az eredmény független az $|u_n^i\rangle$ bázis konkrét választásától, hiszen a (18.4) alpontban láttuk, hogy a projekció egyértelmű. A valószínűséget szemléletesen úgy kapjuk, hogy a $|\psi\rangle$ vektort levetítjük az E -nek megfelelő síkra, majd a vetület hosszának négyzetét vesszük.

Abban a legegyszerűbb esetben, amikor α_n nem degenerált, azaz $g_n = 1$, akkor

$$\mathcal{P}(\alpha_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2 = |c_n|^2, \quad (23.5)$$

azaz a kérdéses valószínűség éppen a mérés előtti $|\psi\rangle$ állapot és az $|u_n\rangle$ sajátállapot belső szorzatának az abszolútérték-négyzete, vagy szemléletesen a $|\psi\rangle$ -nek az $|u_n\rangle$ irányába eső vetületének a négyzete.

Folytonos spektrum esetén, azaz ha $A|w_\alpha^\beta\rangle = \alpha|w_\alpha^\beta\rangle$, ahol α folytonos paraméter, és $|w_\alpha^\beta\rangle$ -k általánosított sajátvektorok, amelyek egy további – mondjuk folytonos – β degenerációs paraméterrel is indexelhetők, akkor $E_\alpha = \int |w_\alpha^\beta\rangle \langle w_\alpha^\beta| d\beta$, s így annak a valószínűsége, hogy a mért érték az α_1 és α_2 értékek közé esik:

$$\mathcal{P}(\alpha_1 < \alpha < \alpha_2) = \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \int_\beta |\langle w_\alpha^\beta | \psi \rangle|^2 d\beta d\alpha, \quad (23.6)$$

ahol a második integráljel alsó β indexe azt jelzi, hogy az összes lehetséges β -ra integrálni kell. Ha a mért mennyiség spektruma folytonos, de a degeneráció diszkrét, illetve ha a mért mennyiség diszkrét és a degeneráció folytonos, akkor a fenti összefüggések értelemszerűen módosulnak. Ezekre a későbbiekben látunk példát.

5. Ha az A operátorral jellemzett fizikai mennyiség mérése a $|\psi\rangle$ normált állapotban az α_n diszkrét sajátértéket adja, akkor a mérés után közvetlenül a rendszer állapota a

$$|\psi'\rangle = E_n |\psi\rangle / \sqrt{\langle \psi | E_n | \psi \rangle} \quad (23.7)$$

normált vektor, ahol E_n az α_n -nek megfelelő altérre vetítő projekciós operátor.

Ha a mért mennyiségnek megfelelő operátor spektruma folytonos, akkor a mérési eredményről szükségképpen csak annyi állapítható meg, hogy α valamely $\Delta\alpha = \alpha_2 - \alpha_1$ intervallumba esik, mert egy folytonos változónak mindig van valamilyen hibája, egy ilyen mérés nem elegendően teljes. Ekkor a mérés után az állapot

$$|\psi'\rangle = E_{\Delta\alpha} |\psi\rangle / \sqrt{\langle \psi | E_{\Delta\alpha} | \psi \rangle}, \quad (23.8)$$

ahol

$$E_{\Delta\alpha} = \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \int_\beta |w_\alpha^\beta\rangle \langle w_\alpha^\beta| d\beta d\alpha \quad (23.9)$$

és (23.6)-hoz hasonlóan egy folytonos degenerációt is föltételeztünk. Ezt a posztulátumot szokás *redukciós posztulátumnak* nevezni.

A legegyszerűbb esetben, ha a diszkrét spektrumhoz tartozó α_n nem degenerált, és $A|u_n\rangle = \alpha_n|u_n\rangle$ akkor a végállapot éppen $|u_n\rangle$ egy egységnyi abszolút értékű konstansszorosa vagyis egy az α_n sajátértékhez tartozó normált sajátvektor. Ugyanis ekkor $E_n = |u_n\rangle \langle u_n|$, s így

$$|\psi'\rangle = E_n |\psi\rangle / \sqrt{\langle \psi | E_n | \psi \rangle} = |u_n\rangle \langle u_n | \psi \rangle / \sqrt{\langle \psi | u_n \rangle \langle u_n | \psi \rangle} = |u_n\rangle \frac{\langle u_n | \psi \rangle}{|\langle u_n | \psi \rangle|}. \quad (23.10)$$

Ha α_n degenerált, akkor $E_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i|$. Így a mérés utáni állapot $\sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle / \sqrt{\sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2}$, ahol a $c_n^i = \langle u_n^i | \psi \rangle$.

6. Az állapot időfejlődését a Schrödinger-egyenlet adja meg:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = H |\Psi\rangle. \quad (23.11)$$

ahol a H a rendszer energiájának megfelelő operátor, a Hamilton-operátor. Ennek és általában egyéb operátorok konkrét alakjának megadásához az elmélet bizonyos iránymutatásokat ad, lásd alább a kvantálási szabályokra vonatkozó pontot. De csakúgy mint ahogyan a klasszikus mechanikában a Hamilton-függvényt, vagy az erőtvények alakját a Newton-féle törvények nem rögzítik, ugyanúgy az operátorok konkrét alakjának megadása sem része a kvantummechanika posztulátumainak.

7. *Sokrészecskerendszerekre vonatkozó posztulátum, amelyből speciálisan következik a Pauli-elv.*
Ezt a posztulátumot később fogjuk kimondani.

A posztulátumokat kiegészítjük még az úgynevezett kvantálási szabályokkal. Legyen \mathcal{A} klasszikus fizikai mennyiség, a koordináta és impulzus valamilyen függvénye $\mathcal{A}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. A megfelelő kvantummechanikai operátort úgy kapjuk, hogy az $A_s(\mathbf{R}, \mathbf{P})$ operátort tekintjük, ahol A_s az \mathbf{R} és \mathbf{P} szimmetrizált függvénye.

Bizonyos esetekben azonban az operátort más megfontolások alapján keressük meg. Azt, hogy az így vagy úgy fölirt operátor alakja helyes-e, az eredményekből levont fizikai következtetések helyessége, azaz a modell konzisztenciája dönti el. Ez hasonló ahhoz, ahogyan a klasszikus fizikában az erőtvények helyes alakját az dönti el, hogy a megfelelő mozgásegyenletből következő megoldás, azaz a koordináták és impulzusok időfüggése megegyezik-e a tapasztalattal.

24. Mérések, középérték, szórás

A kvantummechanikában egy \mathcal{A} fizikai mennyiség mérésekor kapott eredmény a véletlentől függ, azaz matematikai értelemben a mérési eredmény egy valószínűségi változó. Ha az \mathcal{A} fizikai mennyiséghez tartozó operátor A , akkor a 3. posztulátum szerint a mért eredmények az A sajátértékei. Tekintsünk egy mérési sorozatot, amelyet olyan részecskéken mérünk, amelyek mindegyike a mérés előtt azonos $|\psi\rangle$ állapotban van, tehát ezeket előzőleg már preparáltuk. Tegyük föl először, hogy a mért sajátértékek diszkrét, és jelöljük N_k -val azt a számot, ahányszor a mérési eredmény α_k -nak adódott.

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

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \frac{1}{N} \sum_k N_k \alpha_k, \quad (24.1)$$

ahol $N = \sum_k N_k$ az összes mérések száma. Az $\frac{N_k}{N}$ számot, amelyre érvényes, hogy $0 \leq \frac{N_k}{N} \leq 1$, az α_k mérése relatív gyakoriságának nevezzük. A (24.1) képlet a kísérletek nyomán kapható középérték, most ezt a formulát extrapolálva $N \rightarrow \infty$ esetre, egy elméleti eredményt írunk le.

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

$$\frac{N_k}{N} \rightarrow \mathcal{P}(\alpha_k). \quad (24.2)$$

A fenti (24.1) összegből így kapott határértéket az \mathcal{A} fizikai mennyiség, illetve a kvantummechanikában inkább az A operátor várható értékének nevezzük és $\langle A \rangle$ -val jelöljük:

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_k \mathcal{P}(\alpha_k) \alpha_k. \quad (24.3)$$

A valószínűségszámításban ezt a mennyiséget a mérési eredmény, mint valószínűségi változó *várható értékének* nevezzük. A kvantummechanika 4. posztulátuma szerint a $\mathcal{P}(\alpha_k)$ valószínűséget meg tudjuk határozni a mért bemenő állapot, illetve az A operátor sajátvektorai segítségével. A posztulátum szerint $\mathcal{P}(\alpha_k) = \sum_i |\langle u_k^i | \psi \rangle|^2$ ha az α_k degenerált. Ha α_k nem degenerált, akkor ez az utóbbi

összeg csak egy tagból áll. Így

$$\begin{aligned}\langle A \rangle_\psi &= \sum_k \sum_i |\langle u_k^i | \psi \rangle|^2 \alpha_k = \sum_k \sum_i \langle \psi | u_k^i \rangle \langle u_k^i | \psi \rangle \alpha_k = \\ &= \sum_k \sum_i \langle \psi | \alpha_k u_k^i \rangle \langle u_k^i | \psi \rangle = \sum_k \sum_i \langle \psi | A u_k^i \rangle \langle u_k^i | \psi \rangle = \langle \psi | A \psi \rangle.\end{aligned}\quad (24.4)$$

Ha a kérdéses mért mennyiség folytonos változó, azaz az operátor spektruma folytonos, akkor jelöljük N_k -val azt a számot, ahányszor a mérési eredményünk a $\Delta\alpha_k = \alpha_{k+1} - \alpha_k$ intervallumba esik, ahol α_k a lehetséges mérési értékeket megadó valós egyenes vagy szakasz egy diszkrét beosztása. Ekkor $N_k/N \approx \mathcal{P}(\tilde{\alpha}_k)\Delta\alpha_k$, ahol $\tilde{\alpha}_k$ egy a $\Delta\alpha_k$ intervallumba eső érték. Ezt tekintjük a $\mathcal{P}(\tilde{\alpha}_k)$ definíciójának. Ebből a mérési eredmények számtani közepe $\sum_k \tilde{\alpha}_k \mathcal{P}(\tilde{\alpha}_k)\Delta\alpha_k$, ami N növelése és a beosztás finomítása esetén az $\int \alpha \mathcal{P}(\alpha) d\alpha$ integrálhoz tart:

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_k \tilde{\alpha}_k \mathcal{P}(\tilde{\alpha}_k) \Delta\alpha_k \rightarrow \int \alpha \mathcal{P}(\alpha) d\alpha = \int \alpha |\langle w_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha = \langle \psi | A \psi \rangle, \quad (24.5)$$

ahol most $|w_\alpha\rangle$ az A operátor nemdegenerált α általánosított sajátértékéhez tartozó általánosított sajátvektora.

A várható érték lineáris a következő értelemben:

$$\langle A + B \rangle_\psi = \langle A \rangle_\psi + \langle B \rangle_\psi, \quad \langle cA \rangle_\psi = c \langle A \rangle_\psi. \quad (24.6)$$

Egy másik mennyiség a – valószínűségi számításban szintén használt – *szórás*, amely az átlagtól való közepes négyzetes eltérés négyzetgyöke. A fizikai mennyiség szórásnégyzetét a

$$(\Delta A)_\psi^2 = \langle (A - \langle A \rangle_\psi)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle_\psi - \langle A \rangle_\psi^2 \quad (24.7)$$

összefüggés definiálja. Ennek (pozitív) négyzetgyöke a szórás. Megmutatjuk, hogy a szórás akkor és csak akkor 0, ha a rendszer a mért A operátor sajátállapotában van. Legyen ugyanis

$$\langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle (A - \langle A \rangle) \psi | (A - \langle A \rangle) \psi \rangle = 0. \quad (24.8)$$

A 0-val való egyenlőség – a belső szorzat pozitív definit volta miatt – akkor és csak akkor érvényes, ha $(A - \langle A \rangle) | \psi \rangle = 0$. Ez utóbbit az

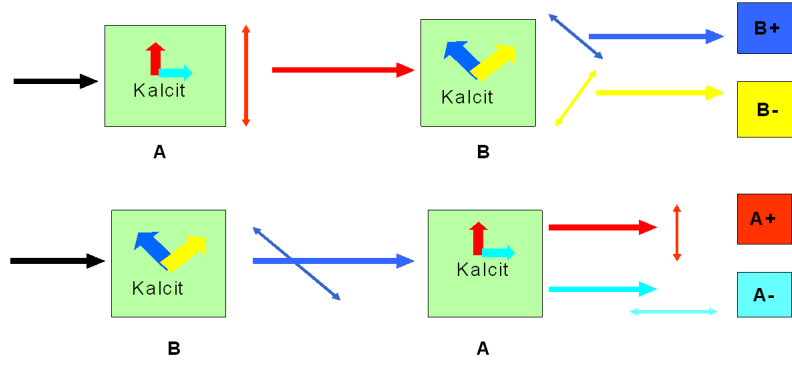
$$A | \psi \rangle = \langle A \rangle | \psi \rangle \quad (24.9)$$

alakba írva látható, hogy ilyenkor $| \psi \rangle$ éppen egy sajátállapot. Valóban, a sajátállapotokon végrehajtott mérés mindig ugyanazt a hozzá tartozó α sajátértéket adja eredményül, s ekkor ezek várható értéke ugyanez a sajátérték, és a szórás nyilvánvalóan 0.

Kiemeljük, hogy mind az $\langle A \rangle$ várható érték, mind a szórás függ attól a $| \psi \rangle$ állapottól, amelyen a méréseket végrehajtjuk.

25. Heisenberg-egyenlőtlenség

Ha két fizikai mennyiség operátora fölcserélhető, akkor mint láttuk, létezik olyan bázis, amely mindkét operátornak egyszerre sajátvektorrendszere. Ezeken az állapotokon hajtva végre a mérést, mindkét mennyiség szórásmentesen mérhető. Ha viszont a két operátor nem fölcserélhető, akkor általában nincs ilyen bázisvektorrendszer és ekkor azt szokás mondani, hogy a két mennyiség nem mérhető "egyidejűleg", noha itt időről valójában nincsen szó. Szimbolikusan mutatja ezt az eredményt az 7. ábra.



(1) A után B illetve (2) B után A esetén a kimenet
biztosan különbözik egymástól,
A és B inkompatibilis

7. ábra. A két mennyiséget, A-t és B-t mérve különböző sorrendben az eredmény nem ugyanaz.

Ha a két mennyiség operátora nem fölcserélhető, akkor tetszőleges állapotban fönnáll egy, a mért mennyiségek, azaz a megfelelő operátorok szórására vonatkozó egyenlőtlenség. Ha A és B önadjungált operátorok, és ezek nem fölcserélhetők, akkor kommutátoruk

$$[A, B] = iC, \quad (25.1)$$

ahol C szükségképpen önadjungált operátor. Ez esetben érvényes az alábbi:

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq |\langle C \rangle|/2 \quad (25.2)$$

Heisenberg- vagy Heisenberg-Robertson-egyenlőtlenségnek nevezett összefüggés.

A bizonyításhoz tekintsük először a lineáris vektorterekben értelmezett belső szorzat egy fontos tulajdonságát az ún. Cauchy-Bunyakovszkij-Schwarz-(Weyl)-egyenlőtlenséget (CBS), amely szerint két tetszőleges vektor $|\varphi\rangle$ és $|\chi\rangle$ esetén

$$\langle \varphi | \varphi \rangle \langle \chi | \chi \rangle \geq |\langle \varphi | \chi \rangle|^2, \quad (25.3)$$

és egyenlőség akkor és csak akkor lehetséges, ha a két vektor valamelyike a zéró vektor, vagy ha a két vektor arányos egymással azaz $|\varphi\rangle = \lambda |\chi\rangle$, ahol λ valamilyen komplex szám.

Bizonyítás: Ha $|\chi\rangle = 0$, vagy ha $|\varphi\rangle = 0$ akkor mindkét oldalon 0 áll, és az egyenlőtlenség (egyenlőség formájában) nyilvánvalóan teljesül. Legyenek ezután $|\varphi\rangle$, $|\chi\rangle \neq 0$ tetszőleges vektorok és λ tetszőleges komplex szám. Tekintsük a $|\varphi - \lambda\chi\rangle$ önmagával vett belső szorzatát, azaz a vektor normájának négyzetét, amely definíció szerint nemnegatív: $\langle \varphi - \lambda\chi | \varphi - \lambda\chi \rangle \geq 0$, és akkor és csak akkor 0, ha $|\varphi - \lambda\chi\rangle$ maga a zéró vektor. Eszerint $0 \leq \langle \varphi - \lambda\chi | \varphi - \lambda\chi \rangle = \langle \varphi | \varphi \rangle + |\lambda|^2 \langle \chi | \chi \rangle - \lambda \langle \varphi | \chi \rangle - \lambda^* \langle \chi | \varphi \rangle$, ahol λ tetszőleges. Legyen speciálisan $\lambda = \langle \chi | \varphi \rangle / \langle \chi | \chi \rangle$. Ekkor $0 \leq |\varphi|^2 + |\lambda|^2 |\chi|^2 - \lambda \langle \varphi | \chi \rangle - \lambda^* \langle \chi | \varphi \rangle = |\varphi|^2 + |\langle \varphi | \chi \rangle|^2 / \langle \chi | \chi \rangle - |\langle \varphi | \chi \rangle|^2 / \langle \chi | \chi \rangle - |\langle \varphi | \chi \rangle|^2 / \langle \chi | \chi \rangle$, amiből átrendezéssel következik, hogy $\langle \varphi | \varphi \rangle \langle \chi | \chi \rangle \geq |\langle \varphi | \chi \rangle|^2$. Látható, hogy valóban egyenlőség van, ha $|\varphi\rangle = \lambda |\chi\rangle$, és fordítva, ha $\langle \varphi | \varphi \rangle \langle \chi | \chi \rangle = |\langle \varphi | \chi \rangle|^2$, akkor $\lambda = \langle \chi | \varphi \rangle / \langle \chi | \chi \rangle$ választásával $\langle \varphi - \lambda\chi | \varphi - \lambda\chi \rangle = 0$, amiből következik, hogy $|\varphi\rangle = \lambda |\chi\rangle$. \square

Most áttérünk a (25.2) egyenlőtlenség bizonyítására. Legyen $|\psi\rangle$ tetszőleges nem zéró vektor, és jelöljük A várható értékét a $|\psi\rangle$ állapotban $\langle A \rangle$ -val, $\langle A \rangle = \langle \psi | A \psi \rangle$, és hasonlóan legyen $\langle B \rangle = \langle \psi | B \psi \rangle$. Legyen most

$$|\varphi\rangle = (A - \langle A \rangle) |\psi\rangle, \quad (25.4)$$

illetve

$$|\chi\rangle = (B - \langle B \rangle) |\psi\rangle. \quad (25.5)$$

Ekkor a $|\psi\rangle$ állapotban vett szórás definíciója szerint:

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = (\Delta A)^2, \quad \text{illetve} \quad \langle\chi|\chi\rangle = (\Delta B)^2, \quad (25.6)$$

továbbá

$$\begin{aligned} |\langle\varphi|\chi\rangle|^2 &= |\langle(A - \langle A\rangle)\psi|(B - \langle B\rangle)\psi\rangle|^2 = \\ &= |\langle\psi|(A - \langle A\rangle)(B - \langle B\rangle)\psi\rangle|^2 = |\langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle|^2. \end{aligned} \quad (25.7)$$

Beírva ezeket a CBS-egyenlőtlenségbe kapjuk, hogy

$$|\langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle|^2 \leq (\Delta A)^2(\Delta B)^2. \quad (25.8)$$

A bal oldalon $\langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$ abszolút érték négyzetét a valós és képzetes rész négyzetösszegeként számítjuk ki. A második tag itt valós, mert A és B önadjungált, tehát várható értékük valós. Az első tagban az AB operátor várható értékét bontsuk föl az operátor szimmetrikus és antiszimmetrikus részének várható értékére, azaz tekintsük a következő azonosságot:

$$\langle AB\rangle \equiv \left\langle \frac{1}{2}(AB + BA) + \frac{1}{2}(AB - BA) \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2}(AB + BA) + i\frac{1}{2}C \right\rangle, \quad (25.9)$$

ahol kihasználtuk, hogy az antiszimmetrikus tag éppen A és B kommutátorának a fele, azaz $iC/2$. Az első tag – a szimmetrikus rész – egyszerűen láthatóan önadjungált, tehát várható értéke valós, míg $iC/2$ várható értéke tiszta képzetes $i\langle C\rangle/2$. A (25.8) bal oldalán álló abszolút érték négyzetéhez $\langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$ valós része

$$\left\langle \frac{1}{2}(AB + BA) \right\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle =: \sigma_{AB}, \quad (25.10)$$

amelyet az A és B operátorok *korrelációjának* nevezünk a $|\psi\rangle$ állapotban. $\langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$ képzetes része viszont éppen $\langle C\rangle/2$. Így a (25.8) bal oldalán szereplő abszolút érték négyzet, vagyis a valós

és képzetes rész abszolút értékének négyzetösszege $\sigma_{AB}^2 + \frac{1}{4}|\langle C\rangle|^2$, azaz (25.8) a következőképpen írható

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq \sigma_{AB}^2 + |\langle C\rangle|^2/4. \quad (25.11)$$

Ez a Heisenberg-Robertson-egyenlőtlenség erős alakja. Az egyenlőtlenség láthatóan a

$$\sigma_{AA}\sigma_{BB} - \sigma_{AB}^2 \geq |\langle C\rangle|^2/4 \quad (25.12)$$

formába is írható. Ennek az egyenlőtlenségnek azonban gyakran egy gyöngébb alakját használjuk. Mivel σ_{AB}^2 nemnegatív, a (25.11) összefüggés jobb oldalát ezzel csökkentve az egyenlőtlenség még inkább érvényes lesz, tehát

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq |\langle C\rangle|^2/4, \quad (25.13)$$

vagyis

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq |\langle C\rangle|/2, \quad (25.14)$$

amely az egyenlőtlenség általában használt alakja. Lényeges, hogy az itt szereplő mennyiségek, tehát a szórás, illetve a várható értékek függenek attól az állapottól, amelyre vonatkozóan kiszámítjuk ezeket, de az egyenlőtlenség tetszőleges olyan állapotban érvényes, amelyekre az A , B és C értelmezve vannak. Az egyenlőtlenség (25.14) alakját tetszőleges operátorokra először Robertson írta föl.

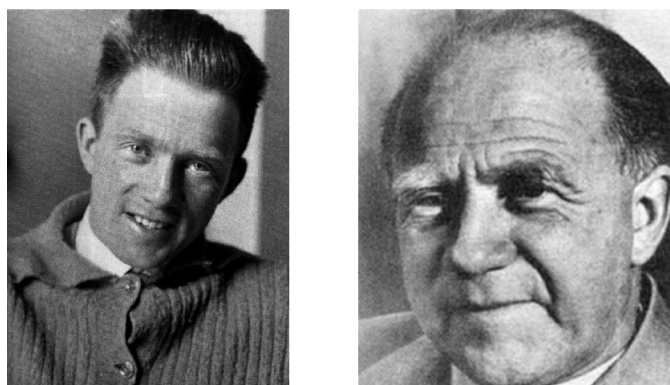
Speciálisan, az $A = X$, $B = P$ operátorok esetére $[X, P] = i\hbar$ miatt az egyenlőtlenség alakja

$$(\Delta X)(\Delta P) \geq \hbar/2, \quad (25.15)$$

amelyet, Heisenberg-egyenlőtlenségnek, illetve néha *bizonytalansági (határozatlansági) relációnak* szokás nevezni.

Az egyenlőtlenségek ezen alakjai statisztikus jelentésűek, a szórásokat illetve a várható értékeket egy adott állapoton elvégzett sok mérésből lehet kiszámítani, és az egyenlőtlenség ezekre vonatkozik. Ebben az értelemben a (25.15) egyenlőtlenséget először Schrödinger írta föl. Heisenberg-től egy más fizikai jelentésű egyenlőtlenség származik, amelyet ő az ún. gamma-mikroszkópja kapcsán mutatott be. Eszerint egyetlen helymérés során az impulzus megváltozik és fordítva, úgy, hogy egyetlen mérésben az elvi bizonytalanságok szorzata nagyobb mint \hbar . Ennek ellenére hagyományosan az (25.15) egyenlőtlenséget szokták Heisenberg-egyenlőtlenségnek nevezni.

Werner Heisenberg (1901-1976)



8. ábra.

Vizsgáljuk meg, hogy melyek azok a speciális $|\psi_0\rangle$ állapotok, amelyekre

$$(\Delta A)_{\psi_0}(\Delta B)_{\psi_0} = |\langle C \rangle_{\psi_0}|/2, \quad (25.16)$$

azaz amelyekre a szórások szorzata a megfelelő operátorok fölcserélhetetlenségéből következően a lehető legkisebb. Ezekre az állapotokra egyrészt a kiinduló Cauchy-Schwartz-egyenlőtlenségben egyenlőségnek kell állnia, azaz a $|\varphi\rangle = \lambda |\chi\rangle$ -ből következő

$$(A - \langle A \rangle) |\psi_0\rangle = \lambda (B - \langle B \rangle) |\psi_0\rangle \quad (25.17)$$

egyenletnek kell teljesülnie. Más szóval a két operátor a *kérdéses állapot*on csak egy konstansszorosban különbözhet egymástól. Az egyenlőséghez emellett még az is szükséges, hogy σ_{AB} eltűnjék a (25.11) szerint.

Számítsuk ki az ezekhez az állapotokhoz tartozó $\langle \varphi | \chi \rangle$ illetve $\langle \chi | \varphi \rangle$ belső szorzatokat:

$$\langle \psi_0 | (A - \langle A \rangle) (B - \langle B \rangle) \psi_0 \rangle = (\Delta A)^2 / \lambda, \quad (25.18)$$

$$\langle \psi_0 | (B - \langle B \rangle) (A - \langle A \rangle) \psi_0 \rangle = \lambda (\Delta B)^2. \quad (25.19)$$

Itt a bal oldalak összege $2\sigma_{AB}$ különbsége $i \langle C \rangle$ ezért ugyanez áll a jobb oldalakra is. A keresett $|\psi_0\rangle$ állapotban, melyben $\sigma_{AB} = 0$, tehát

$$(\Delta A)^2 / \lambda + \lambda (\Delta B)^2 = 0, \quad (25.20)$$

$$(\Delta A)^2 / \lambda - \lambda (\Delta B)^2 = i \langle C \rangle, \quad (25.21)$$

amiből $\lambda = \frac{2(\Delta A)^2}{i\langle C \rangle} = \frac{-i\langle C \rangle}{2(\Delta B)^2}$. Tehát a keresett állapotokon, azokon amelyeken (25.14) egyenlőségbe megy át érvényes, hogy $(A - \langle A \rangle) |\psi_0\rangle = \lambda(B - \langle B \rangle) |\psi_0\rangle$, a fönti λ -val. Ezeket *intelligens állapotoknak* szokás nevezni.

Például, ha $A = X$, és $B = P_x$ egy egydimenziós mozgás esetén, akkor koordinátareprezentációban

$$(x - \langle X \rangle) \psi_0(x) = \frac{2(\Delta X)^2}{i\hbar} (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \langle P_x \rangle) \psi_0(x). \quad (25.22)$$

Ennek a differenciálegyenletnek a normált megoldása:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi(\Delta X)^2}} \exp \left\{ -\frac{(x - \langle X \rangle)^2}{4(\Delta X)^2} + i \langle P_x \rangle x / \hbar \right\}. \quad (25.23)$$

Ez a minimális határozatlanságú hullámcsomag, amelynek abszolútérték-négyzetét, (azaz a koordináta, mint valószínűségi változó valószínűségi sűrűségfüggvényét) Gauss-eloszlásnak vagy másnéven *normális eloszlásnak* nevezzük. A közvetlen számítás is egyszerűen mutatja, hogy ebben az állapotban a koordináta várható értéke éppen $\langle X \rangle$, az impulzusé $\langle P_x \rangle$, a koordináta szórása éppen ΔX , az impulzusé pedig $\Delta P_x = \hbar/2(\Delta X)$.

25.1 Feladat: Oldjuk meg a (25.22) differenciálegyenletet.

25.2 Feladat: Keresük meg ψ_0 -t impulzusreprezentációban úgy, hogy a megfelelő egyenletet impulzusreprezentációban oldjuk meg.

Keressük meg $\psi_0(x)$ Fourier-transzformáltját.

26. Időfejlődés, Schrödinger-egyenlet, kontinuitási egyenlet

26.1. A Schrödinger-egyenlet általános tulajdonságai

A Schrödinger-egyenlet alakja:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = H |\Psi(t)\rangle, \quad (26.1)$$

ahol $|\Psi(t)\rangle$ a rendszer időtől függő állapotát megadó vektor.

Az egyenlet egyik fontos tulajdonsága, hogy lineáris. Ez azt jelenti, hogy ha $|\Psi_1\rangle$ és $|\Psi_2\rangle$ megoldás, akkor megoldás a $c_1 |\Psi_1\rangle + c_2 |\Psi_2\rangle$ vektor is, ahol c_1 és c_2 komplex állandók. Az összeg végtelen sok tagra is kiterjeszthető. A linearitás azért teljesül, mert az idő szerinti deriválás lineáris, illetve a másik oldalon a Hamilton-operátor is lineáris, azaz tagonként alkalmazható. További lényeges tulajdonság, hogy az egyenlet időben elsőrendű, tehát megadva egy $|\Psi(t_0)\rangle$ kezdeti föltételt, a későbbi időpontokban az állapot elvileg meghatározható. Erre vonatkozóan alább látunk majd egy módszert. A linearitással kapcsolatban itt megemlíjtük, hogy természetesen a fönt említett több különböző megoldás különböző kezdeti föltételekhez tartozik. Egy további tulajdonság, hogy az egyenlet megőrzi az állapot $\langle \Psi | \Psi \rangle$ normáját. Ezt a normát – mint tudjuk – a valószínűségi értelmezés miatt 1-nek szoktuk választani. A bizonyításhoz deriváljuk a normát idő szerint, használjuk a Schrödinger-egyenletet, továbbá azt, hogy a H önadjungált:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi | \Psi \rangle &= \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} | \Psi(t) \right\rangle + \left\langle \Psi(t) | \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle = \\ &= \left\langle \frac{1}{i\hbar} H \Psi | \Psi(t) \right\rangle + \left\langle \Psi(t) | \frac{1}{i\hbar} H \Psi \right\rangle = \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \langle H \Psi | \Psi(t) \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi(t) | H \Psi \rangle = 0. \end{aligned} \quad (26.2)$$

Mivel a derivált 0, a $\langle \Psi | \Psi \rangle$ állandó, s így, ha kezdetben 1 volt, akkor a továbbiakban is 1 marad.

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1. \quad (26.3)$$

A Schrödinger-egyenlet fönti tulajdonságai miatt bevezethető egy lineáris operátor, amely a $t = t_0$ időpillanatban vett $|\Psi(t_0)\rangle$ -hoz hozzárendeli a t időbeli $|\Psi(t)\rangle$ -t. Ennek az úgynevezett *evolúciós operátornak* a definíciója így

$$U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle = |\Psi(t)\rangle, \quad (26.4)$$

amely a (26.3) szerint azzal a tulajdonsággal is bír, hogy

$$\langle U(t, t_0) \Psi(t_0) | U(t, t_0) \Psi(t_0) \rangle = \langle \Psi(t_0) | \Psi(t_0) \rangle = 1. \quad (26.5)$$

Ha ez minden $\Psi(t_0)$ -ra fönnáll, akkor abból következik, hogy $U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = U(t, t_0)U^\dagger(t, t_0) = 1$, s az ilyen tulajdonságú operátort *unitérnek* nevezzük.

Tekintsünk egy $V(\mathbf{r})$ potenciáltérben mozgó részecskét, melynek Hamilton-operátora

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{r}). \quad (26.6)$$

A Schrödinger-egyenlet alakja így:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \left(\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) |\Psi(t)\rangle. \quad (26.7)$$

Írjuk ezt most koordinátareprezentációba:

$$i\hbar \langle \mathbf{r} | \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \langle \mathbf{r} | \left(\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) |\Psi(t)\rangle, \quad (26.8)$$

azaz

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (26.9)$$

Ez utóbbi egyenletet írta föl lényegében Schrödinger és ennek speciális stacionárius megoldásait használta sajátérték-egyenletként, amiről később esik majd szó.

26.2. Kontinuitási egyenlet

Most a koordinátareprezentációba írt (26.9) Schrödinger-egyenlet egy következményét fogjuk levezetni, amelyet *kontinuitási egyenletnek* nevezünk. Szorozzuk a (26.9) egyenletet $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$ -vel, a komplex konjugált egyenletet pedig $\Psi(\mathbf{r}, t)$ -vel és vonjuk ki az előbbiből az utóbbit:

$$i\hbar \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*), \quad (26.10)$$

ahol kihasználtuk, hogy a V valós, tehát a $V(\mathbf{r})\Psi\Psi^*$ tagok kiejtik egymást. Az utóbbi egyenletet az

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \quad (26.11)$$

alakba is írhatjuk, azaz

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + \frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = 0. \quad (26.12)$$

A $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \rho(\mathbf{r}, t)$ a részecske térbeli megtalálásának valószínűsége, a

$$\frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) := \mathbf{j} \quad (26.13)$$

vektort pedig *valószínűségi áramsűrűség vektornak* nevezzük. A (26.12) alapján fönnáll a

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{r},t) + \nabla \mathbf{j} = 0 \quad (26.14)$$

kontinuitási egyenletnek nevezett összefüggés, amely formailag teljesen analóg a folyadékok mechanikájának illetve az elektrodinamikának a kontinuitási egyenletével, melyek a tömeg, illetve a töltés megmaradását fejezik ki. A (26.14) kvantummechanikai változat a ρ és \mathbf{j} értelmezése szerint a részecske megtalálási valószínűségének *lokális* megmaradását fejezi ki. Ezt a szokásos módon integrális alakban is megfogalmazhatjuk. Egy rögzített térfogatra integrálva, a Gauss-tétel alkalmazásával kapjuk, hogy

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}} \rho(\mathbf{r},t) = - \oint_{\mathcal{F}} \mathbf{j} \mathbf{n} df. \quad (26.15)$$

A bal oldalon a részecske \mathcal{V} térfogaton belüli megtalálási valószínűségének időbeli változása áll, míg a jobb oldalon az a valószínűségi áram, ami "befolyik" a térfogatba a zárt \mathcal{F} felületen át (az \mathbf{n} vektor a felületből kifelé mutat). Ez indokolja \mathbf{j} elnevezésének jogosságát. Azaz, ha valahol változik a megtalálási valószínűség, az azzal jár, hogy a szomszédos helyeken is változik, éspedig úgy, hogy a nettó változás eltűnik.

27. A várható értékek időfejlődése, Ehrenfest tétele

Vizsgáljuk az A önadjungált operátor által reprezentált fizikai mennyiség

$$\langle \Psi(t) | A \Psi(t) \rangle \equiv \langle A \rangle \quad (27.1)$$

várható értékének időfejlődését a $|\Psi(t)\rangle$ állapotban. Idő szerinti differenciálással és a Schrödinger-egyenlet fölhasználásával nyerjük, hogy

$$\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle. \quad (27.2)$$

Speciálisan az \mathbf{R} és \mathbf{P} operátorokra alkalmazva a fönti összefüggést egy $H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R})$ Hamilton-operátor esetén kapjuk, hogy

$$\frac{\partial \langle \mathbf{R} \rangle}{\partial t} = \frac{\langle \mathbf{P} \rangle}{m}, \quad (27.3)$$

$$\frac{\partial \langle \mathbf{P} \rangle}{\partial t} = - \langle \nabla V(\mathbf{R}) \rangle. \quad (27.4)$$

A (27.3 és 27.4) összefüggésekben a kommutátornak a 22.3 feladatban bizonyított deriváló tulajdonságát használtuk. Ez utóbbiakat, melyek a klasszikus mozgásegyenlet kvantumos megfelelői, nevezzük *Ehrenfest tételeinek*.

Hasonlóságok és különbségek a klasszikus mozgásegyenlettel: Vizsgáljuk meg most, hogy milyen értelemben felelnek ezek meg a klasszikus mozgásegyenletnek egy $\Psi(\mathbf{r},t)$ hullámfüggvénnyel jellemzett részecske esetén. Az $\langle \mathbf{R} \rangle_t$ várható érték három, már csak az időparamétertől függő számot jelent, ez egy durva jellemzője a mozgásának, mert ez csupán a $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2$ valószínűségi sűrűség "súlypontja". Fölvetődik a kérdés, hogy ez a súlypont úgy mozog-e mint a megfelelő klasszikus mechanikai probléma esetén maga a részecske. Ez akkor lenne így, ha (27.4) jobb oldalán az \mathbf{F}_{cl} klasszikus erőnek a súlypont helyén vett értéke állana, azaz, ha érvényes lenne, hogy $\mathbf{F}_{cl}(r = \langle \mathbf{R} \rangle) = -\nabla V(r = \langle \mathbf{R} \rangle)$. Azonban a jobb oldalon

$$- \langle \nabla V(\mathbf{R}) \rangle \neq -\nabla V(r = \langle \mathbf{R} \rangle) \quad (27.5)$$

áll, mert egy függvény várható értéke általában nem egyenlő a függvény értékével a változó várható értékének helyén. Ezért a $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ súlypontja nem úgy mozog, ahogyan a megfelelő klasszikus részecske az adott potenciálban. Meg lehet mutatni, hogy kivételt ez alól azok az esetek jelentenek, amikor a V potenciál legfőljebb kvadratikus függvénye a koordinátának, azaz az erőmentes részecske, az állandó erő hatása alatt mozgó részecske, és a koordináta négyzetétől függő potenciális energia esetén, amely ha vonzó, akkor éppen a harmonikus rezgésnek felel meg. Az említett kivételes eseteken kívül viszont (27.5)-ben nincs egyenlőség.

Tekintsünk azonban egy olyan $\Psi(\mathbf{r}, t)$ állapotot, amely igen jól lokalizált. Ez alatt azt értjük, hogy azon a tartományon ahol $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ különbözik nullától a $\nabla V(\mathbf{r})$, vagyis az erő, lényegében állandó. Ekkor koordinátareprezentációban számolva közelítőleg érvényes, hogy

$$\begin{aligned}\langle \nabla V(\mathbf{R}) \rangle &= \int d^3r \Psi^*(\mathbf{r}, t) [\nabla V(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 [\nabla V(\mathbf{r})] \approx \\ &\approx \nabla V(\mathbf{r} = \langle \mathbf{R} \rangle) \int d^3r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \nabla V(\mathbf{r} = \langle \mathbf{R} \rangle)\end{aligned}\quad (27.6)$$

mert $\nabla V(\mathbf{r})$, közel állandó lévén, kivihető az integráljel elé az $\mathbf{r} = \langle \mathbf{R} \rangle$ helyen vett értékével, ahol a $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ lokalizálva van. Ebben az esetben tehát a $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ súlypontja közelítőleg úgy mozog, mint a megfelelő erő hatása alatt mozgó klasszikus részecske. Ez felel meg a klasszikus határesetnek.

28. Az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldása konzervatív rendszerekre.

Tegyük föl, hogy az

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = H |\Psi\rangle \quad (28.1)$$

Schrödinger-egyenletben H nem függ az időtől. Keressük ennek az egyenletnek a megoldását a H sajátvektorai

$$H |u_{m,i}\rangle = \varepsilon_m |u_{m,i}\rangle \quad (28.2)$$

szerinti sorfejtés alakjában:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{m,i} c_m^i(t) |u_{m,i}\rangle, \quad (28.3)$$

ahol föltételeztük azt, hogy H spektruma diszkrét. Itt a $c_m^i(t)$ együtthatók az idő függvényei, és az $|u_{m,i}\rangle$ rendszer az időtől független ortonormált bázis a térben. Az utóbbi tulajdonságot a H önadjungált volta biztosítja. Írjuk be ezt a sorfejtést (28.1)-be, kapjuk, hogy

$$i\hbar \sum_{m,i} \frac{\partial}{\partial t} c_m^i(t) |u_{m,i}\rangle = H \sum_{m,i} c_m^i(t) |u_{m,i}\rangle = \sum_{m,i} c_m^i(t) \varepsilon_m |u_{m,i}\rangle. \quad (28.4)$$

Szorozzuk meg az egyenletet skalárisan $|u_{n,k}\rangle$ -vel, és használjuk ki az $|u_{m,i}\rangle$ rendszer ortonormált voltát. Kapjuk, hogy

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_n^k(t) = c_n^k(t) \varepsilon_n, \quad (28.5)$$

amelynek megoldása $c_n^k(t) = c_n^k(t_0) e^{-i\varepsilon_n(t-t_0)/\hbar}$, ahol a $c_n^k(t_0)$ -k az együtthatók a t_0 időpillanatban. Ezek szerint a megoldás:

$$\Psi(t) = \sum_{n,k} c_n^k(t_0) e^{-i\varepsilon_n(t-t_0)/\hbar} |u_{n,k}\rangle. \quad (28.6)$$

Ezek szerint a Schrödinger-egyenlet megoldásának egyik lehetséges módja, ha megkeressük H sajátértékeit és sajátvektorait, mert ezek segítségével a megoldás a fönti sor segítségével előállítható.

A $c_n^k(t_0)$ kezdeti kifejtési együtthatókat a keresett megoldás kezdeti értéke szabja meg, amelyet egy konkrét megoldás fölírásához meg kell adnunk. Legyen ez $|\Psi(t_0)\rangle$, akkor

$$|\Psi(t_0)\rangle = \sum_{n,k} c_n^k(t_0) |u_{n,k}\rangle, \quad (28.7)$$

amiből

$$c_n^k(t_0) = \langle u_{n,k} | \Psi(t_0) \rangle. \quad (28.8)$$

Így egy adott kezdeti $|\Psi(t_0)\rangle$ -hoz tartozó megoldás:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n,k} e^{-i\varepsilon_n(t-t_0)/\hbar} |u_{n,k}\rangle \langle u_{n,k} | \Psi(t_0) \rangle. \quad (28.9)$$

A t_0 kezdeti időpillanatot egyébként rendszerint 0-nak szoktuk választani.

Ha a H spektruma folytonos, akkor hasonló megfontolással a

$$\Psi(t) = \int \sum_{k=1}^{g\varepsilon} e^{-i\varepsilon(t-t_0)/\hbar} |u_{\varepsilon,k}\rangle \langle u_{\varepsilon,k} | \Psi(t_0) \rangle d\varepsilon \quad (28.10)$$

eredmény adódik, ahol föltételeztük, hogy a folytonos spektrumba eső ε sajátérték degenerációja diszkrét: g_ε -szoros.

Stacionárius állapotok: A föntiek alapján egy olyan állapotnak, amely H sajátállapota az időfejlődése triviális:

$$|u_{n,k}\rangle e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}. \quad (28.11)$$

Ezért azokat az időfüggő állapotokat amelyek H egy adott sajátértékéhez tartoznak *stacionárius állapotoknak* nevezzük. Szokásos ez az elnevezés magukra az időfüggetlen $|u_{n,k}\rangle$ sajátállapotokra is. Nyilván bármely adott energiasajátértékhez tartozó degenerált sajátállapotok

$$\left(\sum_{k=1}^{g\varepsilon} c_k |u_{n,k}\rangle \right) e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} \quad (28.12)$$

lineáris kombinációja – összegzés csak a k degenerációs indexre történik – is stacionárius. A stacionárius állapotok minden időpillanatban H sajátállapotai a $H |u_{n,k}\rangle e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} = \varepsilon_n |u_{n,k}\rangle e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}$ képletnek megfelelően ugyanazzal az ε_n sajátértékkel. Ez a Bohr-féle első posztulátum kvantummechanikai magyarázata.

29. Mozgásállandók, Bohr-frekvenciák

29.1. Mozgásállandók

Mozgásállandónak nevezünk egy fizikai mennyiséget, amely nem függ explicite az időtől, és amely fölcserélhető a H Hamilton-operátorral:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = 0, \quad (29.1)$$

$$[A, H] = 0. \quad (29.2)$$

Konzervatív rendszerre láthatólag maga H is mozgásállandó. Érvényesek továbbá a következő tételek:

(i) Mozgásállandó várható értéke tetszőleges állapotban állandó

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi | A | \Psi \rangle = 0, \quad (29.3)$$

ez következik a mozgásállandó fönti definíciójából és a (27.2) összefüggésből.

(ii) Ha A mozgásállandó, akkor *vannak* a rendszernek olyan *stacionárius* állapotai, amelyek minden időpillanatban A ugyanazon sajátértékéhez tartoznak. Ez utóbbiak az ún. “jó kvantumszámok”.

Mivel A és H fölcserélhetők, van olyan $|u_{n,i,l}\rangle$ bázis, amelyben mindkét operátor diagonális azaz

$$H|u_{n,i,l}\rangle = \varepsilon_n |u_{n,i,l}\rangle, \quad (29.4)$$

$$A|u_{n,i,l}\rangle = \alpha_i |u_{n,i,l}\rangle. \quad (29.5)$$

Itt l egy olyan index, amely egy lehetséges további degenerációt jelez, amennyiben A és H nem CSCO. Mivel az $|u_{n,i,l}\rangle$ -ek (29.4) szerint stacionárius állapotok, ezért időben (28.11) alapján $|u_{n,i,l}\rangle e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}$ szerint változnak. Emiatt pedig minden későbbi időpillanatban is sajátvektorai A -nak ugyanazzal az α_i sajátértékkel, hiszen $A|u_{n,i,l}\rangle e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} = \alpha_i e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} |u_{n,i,l}\rangle$. Ezért nevezzük az α_i sajátértékeket jó kvantumszámmak.

(iii) Annak a valószínűsége, hogy A mérésekor a $|\Psi(t)\rangle$ állapotban az α_i sajátértéket találjuk, nem függ az időtől. Ez a valószínűség a 4. posztulátum szerint $\mathcal{P}(\alpha_i) = \sum_{n,l} |c_{n,i,l}(t)|^2$, ahol $c_{n,i,l}(t) = \langle u_{n,i,l} | \Psi(t) \rangle = c_{n,i,l}(0) e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}$, ahol most a t_0 kezdeti időpontot 0-nak választottuk. Mivel $|c_{n,i,l}(t)|^2 = |c_{n,i,l}(0)|^2$, ezért a $\mathcal{P}(\alpha_i)$ valóban időtől független.

29.2. Bohr-frekvenciák és a kiválasztási szabályok eredete

Legyen most D egy tetszőleges önadjungált operátor, amely általában nem cserélhető föl a H -val. Vizsgáljuk meg, hogyan változik D várható értéke egy konzervatív rendszerben. Mivel itt $|\Psi(t)\rangle = \sum_{n,k} c_n^k(t) e^{-i\varepsilon_n(t-t_0)/\hbar} |u_{n,k}\rangle$, a $\langle \Psi(t) | D | \Psi(t) \rangle$ várható értéket ki tudjuk írni. $t_0 = 0$ esetben

$$\begin{aligned} \langle \Psi(t) | D | \Psi(t) \rangle &= \sum_{n',k'} \sum_{n,k} c_{n'}^{k'*}(0) e^{+i\varepsilon_{n'} t/\hbar} c_n^k(0) e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} \langle u_{n',k'} | D | u_{n,k} \rangle = \\ &= \sum_{n',k'} \sum_{n,k} c_{n'}^{k'*}(0) c_n^k(0) e^{+i(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n)t/\hbar} \langle u_{n',k'} | D | u_{n,k} \rangle. \end{aligned} \quad (29.6)$$

Tegyük föl most, hogy D nem függ explicite az időtől, az $\langle u_{n',k'} | D | u_{n,k} \rangle$ mátrixelemek tehát állandók. A (29.6) formula mutatja, hogy a $\langle D \rangle$ időfüggését $(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n)/\hbar = \omega_{n'n}$ körfrekvenciával, azaz $(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n)/\hbar = \nu_{n'n}$ frekvenciával oszcilláló tagok összege adja, ezeket nevezzük *Bohr-frekvenciáknak*. A legfontosabb példa erre, amikor a D mennyiség éppen egy atomi rendszer elektromos dipólusmomentuma, melynek várható értéke tehát a különböző Bohr-frekvenciákkal oszcillál. A rezgő dipólusmomentum – az elektrodinamikából ismert módon – viszont éppen ilyen diszkrét frekvenciájú elektromágneses hullámokat bocsát ki, és ezek spektrumát mérjük a spektroszkópiában. Ez az összefüggés alapozza meg tehát mélyebben a második Bohr-féle posztulátumot, vagyis, hogy az atomi rendszer spektrumában a stacionárius állapotokhoz tartozó energiakülönbségek és a h Planck-állandó hányadosa által meghatározott frekvenciákat látunk.

A $\langle \psi(t) | D | \psi(t) \rangle$ várható értékben azonban csak azok a frekvenciák jelennek meg, amelyekre az $\langle u_{n',k'} | D | u_{n,k} \rangle$ mátrixelemek nem tűnnek el. A H -tól és D -tól függően sok esetben egyszerű szabályok adhatók arra nézve, hogy melyek ezek a nem eltűnő mátrixelemek. A nem eltűnő mátrixelemek tehát kiválasztják azokat a frekvenciákat, amelyek ténylegesen megjelennek. Ezért azokat a szabályokat, amelyek megadják, hogy melyek a nem eltűnő mátrixelemek, *kiválasztási szabályoknak* nevezzük. Ezeket a szabályokat – sőt részben magukat a mátrixelemeket is – általában szimmetria megfontolások alapján lehet megtalálni.

30. A szabad részecske kvantummechanikai tárgyalása

A szabad részecske Schrödinger-egyenlete egydimenzióban:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{P^2}{2m} \Psi. \quad (30.1)$$

A stacionárius állapotok a $\frac{P^2}{2m}$ sajátvektorai, ezek pedig azonosak P sajátvektoraival, azaz a $P|p\rangle = p|p\rangle$, ahol p bármilyen valós érték lehet. Ez utóbbiak a de Broglie-hullámok koordinátareprezentációban. A $p^2/2m$ energiasajátértékek kétszeresen degeneráltak, a p és a $-p$ impulzusú állapot ugyanahhoz az energiasajátértékhez tartozik. Az általános időfüggő megoldás:

$$|\Psi(t)\rangle = \int |p\rangle \langle p| \Psi(0)\rangle e^{-ip^2 t/2m\hbar} dp, \quad (30.2)$$

itt $\langle p| \Psi(0)\rangle =: \tilde{\psi}_0(p)$ a kezdeti állapot impulzusreprezentációban. Ebből

$$\begin{aligned} \langle p'| \Psi(t)\rangle &= \tilde{\Psi}(p', t) = \int \langle p'| p\rangle \langle p| \Psi(0)\rangle e^{-ip^2 t/2m\hbar} dp = \\ &= \int \delta(p' - p) \tilde{\psi}_0(p) e^{-ip^2 t/2m\hbar} dp = \tilde{\psi}_0(p') e^{-ip'^2 t/2m\hbar}, \end{aligned} \quad (30.3)$$

azaz a megoldás impulzusreprezentációban p' helyett p -t írva:

$$\tilde{\Psi}(p, t) = \tilde{\psi}_0(p) e^{-ip^2 t/2m\hbar}. \quad (30.4)$$

Koordinátareprezentációban az eredmény ennek a Fourier-transzformáltja:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\psi}_0(p) e^{-ip^2 t/2m\hbar} e^{ipx/\hbar} dp, \quad (30.5)$$

amint ezt már korábban is láttuk. Ha a kezdeti állapotban a $\psi_0(x)$ koordináta-hullámfüggvény adott, akkor ebből $\tilde{\psi}_0(p)$ a

$$\tilde{\psi}_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi_0(x) e^{-ipx/\hbar} dx \quad (30.6)$$

inverz Fourier-transzformációval adódik. Majd ennek ismeretében a (30.5) alapján lehet meghatározni $\Psi(x, t)$ -t, ez utóbbi is egy Fourier-transzformáció.

Közvetlenül koordinátareprezentációban is megoldhatjuk a problémát. Az energiasajátérték-egyenlet ebben az esetben:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} = \varepsilon u. \quad (30.7)$$

Ennek megoldásai $\varepsilon < 0$ esetben a plusz vagy a mínusz végtelenben exponenciálisan divergáló függvényt adnak, amelyekből szuperpozícióval sem lehet négyzetesen integrálható megoldást kapni. Az $\varepsilon \geq 0$ esetben viszont – noha maguk a megoldások nem tartoznak L^2 -be – azokból szuperpozícióval már fizikailag elfogadható megoldást kapunk. Ebben az esetben a (30.7) másodrendű egyenlet két lineárisan független megoldása közül a következő párokat szokás választani:

$$e^{ikx}, \quad e^{-ikx}, \quad (30.8)$$

$$\cos kx, \quad \sin kx, \quad (30.9)$$

ahol $k = \sqrt{2m\varepsilon/\hbar^2} > 0$, azaz egy adott $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ energiasajátérték kétszeresen degenerált. Az e^{ikx} , e^{-ikx} párról könnyen látható, illetve ismert, hogy ezek az impulzus sajátfüggvényei is, $p_+ = \hbar k$ illetve $p_- = -\hbar k$ sajátértékekkel, melyek a fentebb említett – adott energiához tartozó – két degenerált de Broglie-hullámmal azonosak. Az általános megoldás az előző fejezet receptje szerint

$$\int_0^\infty (c_+(\varepsilon) e^{ikx} + c_-(\varepsilon) e^{-ikx}) e^{-i\varepsilon t/\hbar} d\varepsilon. \quad (30.10)$$

Ez átírható k szerinti integrálok összegévé

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \tilde{c}_+(k) e^{ikx} e^{-i\frac{\hbar k^2 t}{2m}} \frac{\hbar^2 k}{m} dk - \int_0^{-\infty} \tilde{c}_-(-k) e^{ikx} e^{-i\frac{\hbar k^2 t}{2m}} \frac{\hbar^2 k}{m} dk = \\ = \int_{-\infty}^\infty f(k) e^{ikx} e^{-i\frac{\hbar k^2 t}{2m}} dk, \end{aligned} \quad (30.11)$$

ahol

$$\tilde{c}_\pm(k) = c_\pm(\hbar^2 k^2 / 2m) \quad \text{és} \quad f(k) = \begin{cases} \tilde{c}_+(k) \frac{\hbar^2 k}{m} & \text{ha } k > 0, \\ \tilde{c}_-(-k) \frac{\hbar^2 k}{m} & \text{ha } k < 0. \end{cases}$$

Vagy a $\hbar k = p$ jelöléssel és $\frac{\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} f(p/\hbar) = \tilde{\psi}_0(p)$ -vel visszakapjuk az előző (30.5) formulát.

30.1 Feladat: Milyen operátor sajátértékei tesznek különbséget a $\cos kx$ és a $\sin kx$ energiasaját-függvények között?

Ha nem akarjuk az állapot időfejlődését explicite is megadni, hanem megelégszünk az X és P várható értékének és szórásának meghatározásával, akkor az Ehrenfest-tételek ismételt alkalmazásával ez igen tanulságosan megtehető. A $H = \frac{P^2}{2m}$ és a (27.3) és (27.4) alapján:

$$\frac{d\langle X \rangle}{dt} = \frac{\langle P \rangle}{m}, \quad \frac{d\langle P \rangle}{dt} = 0, \quad \langle P \rangle = p_0. \quad (30.12)$$

Ebből látható hogy egy kezdetben $\langle X \rangle_0 = x_0$ koordináta, illetve $\langle P \rangle_0 = p_0$ impulzus várható értékkel bíró állapot fejlődése során az impulzus várható értéke nem változik, a koordináta várható értéke pedig az idő múlásával a klasszikus esetnek megfelelően az $\langle X \rangle = x_0 + \frac{p_0}{m}t$ képletnek megfelelően $\frac{p_0}{m}$ egyenletes sebességgel halad. Az impulzus szórása sem változik, mivel:

$$\frac{d(\Delta P)^2}{dt} = \frac{d\langle P^2 \rangle}{dt} - \frac{d\langle P \rangle^2}{dt} = 0, \quad (30.13)$$

s így $(\Delta P)^2 = \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2$ állandó.

Most megmutatjuk, hogy a koordináta szórása viszont nő, (az állapot hullámfüggvénye szétfolyik) mert a fázissebesség p -függő: ez olyan mint egy diszperzív – azaz frekvenciafüggő törésmutatóval bíró – közegben terjedő elektromágneses hullám szétfolyása. Deriváljuk idő szerint $(\Delta X)^2$ -et

$$\begin{aligned} \frac{d(\Delta X)^2}{dt} &= \frac{d\langle X^2 \rangle}{dt} - \frac{d\langle X \rangle^2}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [H, X^2] \rangle - 2\langle X \rangle \frac{d\langle X \rangle}{dt} = \\ &= \frac{1}{m} \langle XP + PX \rangle - \frac{2}{m} \langle X \rangle \langle P \rangle = \frac{2\sigma_{PX}}{m}, \end{aligned} \quad (30.14)$$

ahol σ_{PX} a 25. szakaszban bevezetett korrelációs függvény, amely szabad részecske esetén, mint mindjárt látni fogjuk, az időnek lineáris függvénye. Deriváljuk idő szerint még egyszer $(\Delta X)^2$ -et

$$\begin{aligned} \frac{d^2(\Delta X)^2}{dt^2} &= \frac{i}{m\hbar} \langle [H, XP + PX] \rangle - \frac{2}{m^2} \langle P \rangle^2 = \frac{i}{2m^2\hbar} \langle [P^2, XP + PX] \rangle - \frac{2}{m^2} \langle P \rangle^2 = \\ &= \frac{2}{m^2} (\langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2) = \frac{2}{m^2} (\Delta P)^2, \end{aligned} \quad (30.15)$$

mert

$$P^2XP - XPP^2 = P^3X + i\hbar P^2 - XP^3 = -2i\hbar P^2, \quad (30.16)$$

$$P^2PX - PXP^2 = P^3X - XP^3 + i\hbar P^2 = -2i\hbar P^2. \quad (30.17)$$

Mivel $(\Delta P)^2$ (30.13) miatt állandó, (30.15) szerint $\frac{d^2(\Delta X)^2}{dt^2}$ is állandó. Eszerint $\frac{d(\Delta X)^2}{dt}$ s így (30.14) szerint σ_{PX} is az időnek legfőbb lineáris függvénye, azaz $(\Delta X)^2$ legfőbb kvadrátikus függvény. Vagyis a (30.15) egyenlet egyszerűen integrálható és

$$(\Delta X)^2 = \frac{2}{m^2}(\Delta P)_0^2 \frac{t^2}{2} + 2 \frac{\sigma_{PX}}{m} t + (\Delta X)_0^2. \quad (30.18)$$

Ez a kifejezés a t -nek egy állandó együtthatókkal vett másodfokú kifejezése, azaz parabola. A $(\Delta P)_0^2$ a de Broglie-hullám kivételével minden állapotban pozitív, ezért elegendő idő múlva a $(\Delta X)^2$ az idő négyzetével arányosan nő, azaz a szabad részecskét jellemző állapot szórásnégyzete négyzetesen nő, a hullámcsomag szétfolyik. Pl. intelligens (Gauss alakú) állapotra, amint azt a (25.16) összefüggés kapcsán láttuk, $\sigma_{PX} = 0$, továbbá ebben az esetben $(\Delta P)_0^2 = \frac{\hbar^2}{4(\Delta X)_0^2}$ így erre az állapotra

$$(\Delta X)^2 = (\Delta X)_0^2 \left(1 + \frac{\hbar^2}{4m^2(\Delta X)_0^4} t^2 \right), \quad (30.19)$$

azaz a szétfolyás annál gyorsabb minél kisebb volt $(\Delta X)_0^2$, azaz a kezdeti szélesség, és minél kisebb a részecske tömege. Ezt a formulát szokás a


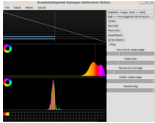
$$(\Delta X) = (\Delta X)_0 \sqrt{1 + \Delta^2} \quad (30.20)$$

alakba is írni, ahol $\Delta = \frac{\hbar}{2m(\Delta X)_0^2} t$. A $\Delta = \sqrt{3}$ érték megadja, hogy m -től és $(\Delta X)_0$ -tól függően mennyi idő alatt nő a lokalizáltság a kétszeresére. Ugyanez az eredmény egy Gauss alakú kezdeti hullámfüggvényre vonatkozóan a (30.6) és a (30.5) összefüggések segítségével az időfüggő hullámfüggvény explicit kiszámításával is megkapható.

30.2 Feladat: Mennyi idő alatt nő a koordináta szórása a kétszeresére egy $m = 0,1$ g-os részecskére, amely kezdetben egy atomi méretre, azaz $(\Delta X)_0 = 10^{-10}$ m hosszúságra van lokalizálva?

30.3 Feladat: Egy alfa részecske mérete klasszikusan kb. 10^{-13} m. Mennyi idő alatt nő ez a lokalizáltság a kétszeresére? Tegyük föl, hogy az alfa részecske a fénysebesség 30-ad részével repül. Mekkora távolságot tesz meg ez alatt az idő alatt, és hogyan viszonyul ez egy atommag méretéhez? Milyen következtetést vonunk le ebből?

30.4 Feladat: Tegyük föl, hogy egy elektron kezdetben egy kb. $r_c = 10^{-15}$ m térrészre van lokalizálva. Ez adódik ha fölteszük, hogy az elektron nyugalmi energiája az általa hordozott töltés elektrosztatikus energiájával egyezik meg, azaz nagyságrendileg $m_e c^2 = (1/4\pi\epsilon_0)q_e^2/r_c$. Mennyi idő alatt nő kétszeresére ez a lokalizáltság?

KVANTUMÁLLAPOTOK HOMOGENEUS ELEKTROMOS TÉRBEN		
		Ez a java applet egydimenzióban mozgó töltött kvantum részecske dinamikáját mutatja különböző potenciálok és statikus elektromos tér jelenlétében. A további magyarázatokat és beállítási lehetőségeket illetően olvassuk el a „Részletes leírás”-t. RÉSZLETES LEÍRÁS

31. A harmonikus oszcillátor sajátérték-problémája

A következőkben egy algebrai módszerrel oldjuk meg a harmonikus oszcillátor energiasajátérték-problémáját. A harmonikus oszcillátor Hamilton-operátora:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2, \quad (31.1)$$

amelyben az X és P operátorok az $[X, P] = i\hbar$ fölcserélési relációt teljesítik. Vezessük be az

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X + i \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} P \right) \quad (31.2)$$

és

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X - i \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} P \right) \quad (31.3)$$

nem önadjungált és dimenziótlán operátorokat, melyek egymás adjungáltjai. Az $[a, a^\dagger]$ kommutátor kiszámításához az X és P operátorokra vonatkozó fölcserélési relációt alkalmazva az

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (31.4)$$

eredményt kapjuk. Az X és P operátorokat kifejezve a -val és a^\dagger -al, majd ezeket beírva (31.1)-be a Hamilton-operátorra a

$$H = \hbar\omega(a^\dagger a + 1/2) \quad (31.5)$$

kifejezést nyerjük. A H sajátértékeinek és sajátvektorainak meghatározása, azaz a

$$H|\varphi\rangle = \varepsilon|\varphi\rangle \quad (31.6)$$

egyenlet megoldásainak megkeresése az

$$a^\dagger a = N \quad (31.7)$$

operátor sajátállapotainak meghatározásával ekvivalens. N önadjungált és pozitív operátor, tehát sajátértékei csak nemnegatív valós számok lehetnek. Ha ugyanis ν sajátérték, és $|\varphi\rangle$ egy hozzá tartozó sajátvektor: $N|\varphi\rangle = \nu|\varphi\rangle$, akkor $\nu\langle\varphi|\varphi\rangle = \langle\varphi|N\varphi\rangle = \langle\varphi|a^\dagger a\varphi\rangle = \|a\varphi\|^2 \geq 0$. Tehát $\nu\langle\varphi|\varphi\rangle \geq 0$, és mivel $|\varphi\rangle$ nem zéró, hiszen sajátvektor, a normája pozitív, amiből következik, hogy $\nu \geq 0$.

Meg fogjuk most mutatni, hogy N sajátértékei a nemnegatív *egész* számok. Ezek meghatározása céljából szorozzuk az

$$aa^\dagger - a^\dagger a = 1 \quad (31.8)$$

fölcserélési relációt jobbról a -val, illetve balról a^\dagger -al. Kapjuk, hogy $aN - Na = a$, azaz $[N, a] = -a$, illetve $Na^\dagger - a^\dagger N = a^\dagger$, azaz $[N, a^\dagger] = a^\dagger$, vagy átrendezés után:

$$Na = a(N - 1), \quad (31.9)$$

$$Na^\dagger = a^\dagger(N + 1). \quad (31.10)$$

Vizsgáljuk ezután az $a^{\dagger k} a^k$ operátort, ahol $k \geq 1$ egész szám. Teljes indukcióval bebizonyítjuk, hogy

$$a^{\dagger k} a^k = N(N - 1)(N - 2) \dots (N - (k - 1)). \quad (31.11)$$

Az összefüggés $k = 1$ esetén nyilván fönnáll, hiszen az éppen N (31.7) definíciója. Tegyük föl most, hogy (31.11) érvényes k -ra és vizsgáljuk azt $k+1$ -re. Írjuk a vizsgált operátort $a^{\dagger k+1} a^{k+1} = a^\dagger a^{\dagger k} a^k a$ alakba, és használjuk a k -ra igaznak föltett (31.11) összefüggésünket:

$$a^{\dagger k+1} a^{k+1} = a^\dagger a^{\dagger k} a^k a = a^\dagger N(N - 1)(N - 2) \dots (N - (k - 1))a. \quad (31.12)$$

A (31.9) $Na = a(N - 1)$ formula felhasználásával az utolsó helyen álló a -t egyenként sorra átvihetjük az előtte álló faktorok elé, miközben minden tényezőt eggyel csökkentünk. Így :

$$\begin{aligned} a^{\dagger k+1} a^{k+1} &= a^\dagger N(N - 1)(N - 2) \dots a(N - 1 - (k - 1)) = \dots \\ &= a^\dagger Na(N - 2)(N - 3) \dots (N - 1 - (k - 1)) \\ &= a^\dagger a(N - 1)(N - 2) \dots (N - 1 - (k - 1)) = \\ &= N(N - 1)(N - 2) \dots (N - k). \end{aligned} \quad (31.13)$$

Az utolsó sort összehasonlítva (31.11)-el látszik, hogy éppen a bizonyítandó összefüggést kaptuk k helyett $k + 1$ -el, azaz a (31.11) minden $k \geq 1$ egészre érvényes.

Az (31.11) képletből következik, hogy N *spektrumának nem lehet folytonos része*. Ha ugyanis lenne, akkor létezne olyan ν *nem egész* szám és olyan $|\varphi\rangle$ állapot, amelyre $N|\varphi\rangle = \nu|\varphi\rangle$. Erre a $|\varphi\rangle$ állapotra a (31.13) előző összefüggés szerint érvényes, hogy:

$$\langle\varphi|a^{\dagger k}a^k|\varphi\rangle = \nu(\nu - 1)\dots(\nu - (k - 1))\langle\varphi|\varphi\rangle. \quad (31.14)$$

A bal oldal minden $k \geq 1$ -re nemnegatív, mert bármely $|\varphi\rangle$ állapotra $\langle\varphi|a^{\dagger k}a^k|\varphi\rangle = \|a^k\varphi\|^2 \geq 0$. A jobb oldal viszont $\langle\varphi|\varphi\rangle > 0$ miatt negatív lenne egy olyan (értelemszerűen egész) $k \geq 1$ -re, amelyre a $\langle\varphi|\varphi\rangle$ -t szorzó tényezők mindegyike pozitív, kivéve az utolsó $\nu - (k - 1)$ tényezőt, amely negatív, olyan ν és k esetén, amelyre $\nu + 1 < k < \nu + 2$ teljesül. Ez az ellentmondás csak akkor nem lép föl, ha N sajátértékeire kikötjük, hogy azok csak *nemnegatív egész számok* lehetnek. Ekkor ugyanis, ha $\nu = n$ egy egész szám, akkor mind a jobb-, mind a bal oldal pozitív, amíg $k \leq n$, és a jobb oldal eltűnik minden $k \geq n + 1$ -re, s így minden ilyen k -ra fönn kell állnia az $a^k|\varphi\rangle = 0$ összefüggésnek is. Tehát a sajátértékek csak nemnegatív egészek lehetnek.

Tegyük föl most – amit alább a koordinátareprezentáció segítségével meg is mutatunk – hogy létezik legalább egy sajátvektor, amelyhez tartozó sajátérték (az előbbieket szerint szükségképpen) valamilyen nemnegatív egész: $\nu = n$. Ezt a sajátvektort jelöljük $|\varphi_n\rangle$ -el:

$$N|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle. \quad (31.15)$$

A (31.14) szerint erre a vektorra az egyenlőség úgy teljesül, hogy minden $k \geq n + 1$ -re

$$a^k|\varphi_n\rangle = 0, \quad k = n + 1, n + 2, \dots \quad (31.16)$$

Speciális esetként látható, hogy ha $n = 0$ sajátérték, azaz $N|\varphi_{n=0}\rangle = 0|\varphi_0\rangle = 0$, akkor $a|\varphi_0\rangle$ a nulla vektor, mert $\langle a\varphi_0|a\varphi_0\rangle = \langle\varphi_0|a^{\dagger}a\varphi_0\rangle = \langle\varphi_0|N\varphi_0\rangle = 0$, azaz a belső szorzat pozitív definit volta miatt

$$a|\varphi_0\rangle = 0. \quad (31.17)$$

Ez fordítva is érvényes, azaz ha egy vektorra $a|\varphi\rangle = 0$, akkor $|\varphi\rangle$ az N -nek 0 sajátértékhez tartozó sajátvektora. Ez közvetlenül következik, ha az a^{\dagger} -t alkalmazzuk az $a|\varphi\rangle = 0$ összefüggésre. (Itt, ahogyan az szokás, a tér nulla vektorát és a nulla számot nem különböztetjük meg, aminek az az oka, hogy tetszőleges $|\varphi\rangle$ vektorra $0|\varphi\rangle$ a nulla vektor.)

Belátható, hogy ha $|\varphi_n\rangle$ sajátvektor n sajátértékkel, akkor $a^{\dagger}|\varphi_n\rangle$ is sajátvektor $(n + 1)$ sajátértékkel:

$$Na^{\dagger}|\varphi_n\rangle = a^{\dagger}aa^{\dagger}|\varphi_n\rangle = a^{\dagger}(a^{\dagger}a + 1)|\varphi_n\rangle = a^{\dagger}(n + 1)|\varphi_n\rangle = (n + 1)a^{\dagger}|\varphi_n\rangle, \quad (31.18)$$

vagyis

$$Na^{\dagger}|\varphi_n\rangle = (n + 1)a^{\dagger}|\varphi_n\rangle. \quad (31.19)$$

Ez tetszőleges $n \geq 0$ esetén érvényes, mert $a^{\dagger}|\varphi_n\rangle$ biztosan nem a nulla vektor, ugyanis

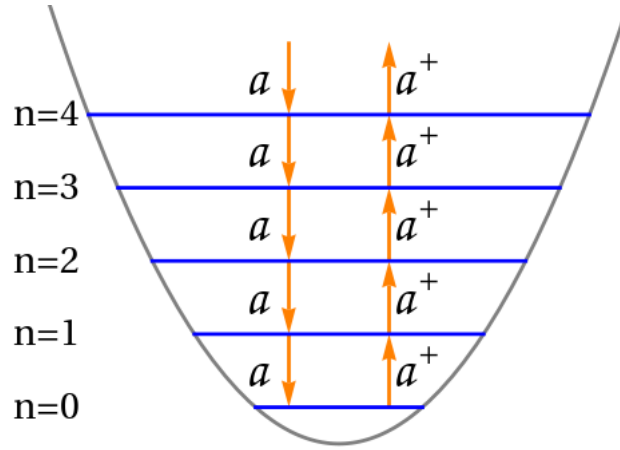
$$\langle a^{\dagger}\varphi_n|a^{\dagger}\varphi_n\rangle = \langle\varphi_n|aa^{\dagger}\varphi_n\rangle = \langle\varphi_n|(1 + a^{\dagger}a)\varphi_n\rangle = (n + 1)\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle > 0, \quad (31.20)$$

hiszen $\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle > 0$, és $n + 1$ is határozottan nagyobb mint 0.

Hasonlóan:

$$Na|\varphi_n\rangle = (n - 1)a|\varphi_n\rangle, \quad (31.21)$$

tehát $a|\varphi_n\rangle$ is sajátvektor $(n - 1)$ sajátértékkel. Ez utóbbi csak $n > 0$ esetén állhat fenn, mert N sajátértékei nemnegatívak.



9. ábra. a és a^\dagger “végiglépegetnek” a sajátállapotokon

A $|\varphi_0\rangle$ -t mint legkisebb n -hez – így (31.5) szerint a legkisebb energiasajátértékhez is – tartozó állapotot *alapállapotnak* szokás nevezni. Az előzőek szerint ezt az állapotot a (31.17) egyértelműen jellemzi, tehát (31.17) -et tekinthetjük az alapállapot definíciójának is, amennyiben megmutatjuk, hogy az $n = 0$ -hoz tartozó sajátvektor, azaz az alapállapot valóban létezik: a hozzá tartozó koordináta-hullámfüggvény négyzetesen integrálható. Bizonyításunkból az is következik majd, hogy az alapállapot nem degenerált. Az alapállapotot definiáló (31.17) $a|\varphi_0\rangle = 0$, azaz

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X + i \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} P \right) |\varphi_0\rangle = 0 \quad (31.22)$$

összefüggés koordinátareprezentációban az

$$\left(\frac{m\omega}{\hbar} x + \frac{d}{dx} \right) \varphi_0(x) = 0 \quad (31.23)$$

differenciálegyenletet adja, amelynek – lévén egy elsőrendű differenciálegyenlet – csak *egyetlen* lineárisan független megoldása létezik:

$$\varphi_0(x) = C e^{-\frac{m\omega}{\hbar} \frac{x^2}{2}}, \quad (31.24)$$

ahol C integrációs állandó. Ez a megoldás valóban négyzetesen integrálható, a normálásból meghatározhatóan $C = (\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{1/4}$. Tehát megmutattuk, hogy az $n = 0$ sajátérték tényleg létezik és nem degenerált.

Most teljes indukcióval megmutatjuk, hogy a többi sajátértékhez is csak egy (lineárisan független) sajátvektor tartozik. Tegyük föl, hogy az állítás igaz n -re, azaz $N|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle$ -ben n nem degenerált. Tudjuk az előzőekből, hogy ekkor létezik az $n + 1$ -hez tartozó sajátvektor is $N|\varphi_{n+1}^i\rangle = (n+1)|\varphi_{n+1}^i\rangle$. Tekintsük most az $a|\varphi_{n+1}^i\rangle$ vektort, ez n -hez tartozó sajátvektora N -nek, és mivel az indukciós hipotézis miatt n nem degenerált, $a|\varphi_{n+1}^i\rangle$ csak egy konstansban különbözhet $|\varphi_n\rangle$ -től, azaz létezik egy olyan c^i szám, amelyre

$$a|\varphi_{n+1}^i\rangle = c^i|\varphi_n\rangle. \quad (31.25)$$

Alkalmazzuk erre az a^\dagger -t, amellyel kapjuk, hogy

$$a^\dagger a|\varphi_{n+1}^i\rangle = c^i a^\dagger|\varphi_n\rangle, \quad (31.26)$$

amiből $a^\dagger a|\varphi_{n+1}^i\rangle = (n+1)|\varphi_{n+1}^i\rangle$ miatt következik, hogy

$$|\varphi_{n+1}^i\rangle = \frac{c^i}{n+1} a^\dagger|\varphi_n\rangle. \quad (31.27)$$

Azt már eddig is tudtuk, hogy $a^\dagger|\varphi_n\rangle$ az $n+1$ -hez tartozó sajátvektora N -nek, most azt látjuk, hogy minden $n+1$ -hez tartozó sajátvektor arányos $a^\dagger|\varphi_n\rangle$ -nel, azaz ezek egymástól mind csak egy konstansban különbözhetnek, vagyis nem degeneráltak. Mivel, mint láttuk, $n=0$ nem degenerált, ezért a teljes indukciót befejeztük. A lineáris harmonikus oszcillátor energia-sajátértékei tehát az

$$\varepsilon_n = \hbar\omega(n + 1/2) \quad (31.28)$$

alakúak, ahol $n = 0, 1, 2 \dots$ a nemnegatív egész számok és ezek nem degeneráltak.

Harmonikus oszcillátor esetén a sajátvektorokra a következő egyszerűsített jelölést szokás használni:

$$|\varphi_n\rangle \equiv |n\rangle. \quad (31.29)$$

Ilyen módon a $|\varphi_n\rangle$ értelmezése szerint, amely az n sajátértékhez tartozó sajátvektor, következik, hogy

$$a^\dagger|n\rangle = c_+|n+1\rangle, \quad a|n\rangle = c_-|n-1\rangle. \quad (31.30)$$

A sajátvektorokat normálnak írva elő: $\langle n|n\rangle = \langle n+1|n+1\rangle = 1$ alapján:

$$|c_+|^2 \langle n+1|n+1\rangle = \langle n|aa^\dagger|n\rangle = \langle n|a^\dagger a + 1|n\rangle = n+1 \quad (31.31)$$

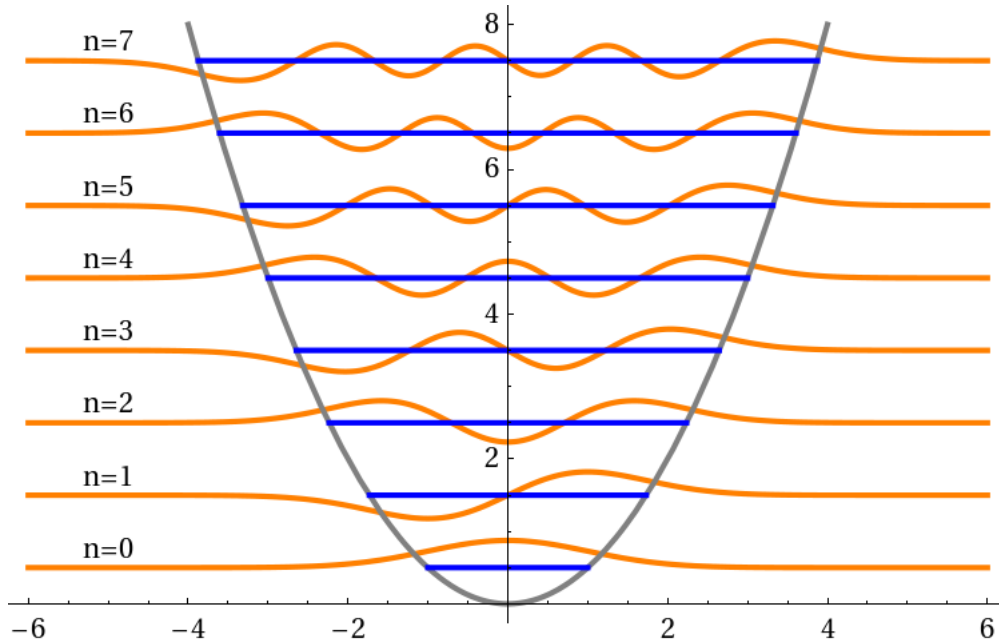
Így konvenció szerint c_+ -t valósnak és pozitívnak választva

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad (31.32)$$

és hasonlóan

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad (31.33)$$

amely $n=0$ esetén éppen az alapállapotot definiáló (31.17) összefüggés.



10. ábra. A harmonikus oszcillátor energiasajátfüggvényei

A normált sajátvektorok ezek szerint előállíthatók $|0\rangle$ -ből az

$$|n\rangle = \left(a^\dagger\right)^n \frac{1}{\sqrt{n!}}|0\rangle \quad n = 0, 1, 2 \dots \quad (31.34)$$

alakban. Meg lehet mutatni, hogy ezek a vektorok valóban teljes rendszert alkotnak, azaz bármely vektor kifejezhető ezek segítségével.

Az operátorok mátrixai a H operátor sajátvektorai által alkotott bázisban: Az a^\dagger operátor eggyel növeli az N sajátértékeit, ezért *keltő*-, az a pedig eggyel csökkenti a sajátértéket, ezért *eltüntető operátornak* szokás nevezni. (Ezek az elnevezések a kvantumelektrodinamikából származnak: az a^\dagger fotont kelt a módusban, míg az a operátor egy fotont tüntet el a módusból.) A különböző $|n\rangle$ -ek ortogonálisak egymásra, mert egy önadjungált operátor – az N – különböző sajátértékeihez tartoznak: $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$. Az N, a^\dagger, a , operátorok mátrixai az $|n\rangle$ állapotok által kifeszített bázisban a következők:

$$[N] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \\ 0 & 0 & 2 & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}, \quad (31.35)$$

$$[a^\dagger] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ \vdots & & \sqrt{3} & \ddots \end{pmatrix}, \quad (31.36)$$

a mátrixa pedig az a^\dagger adjungáltja lévén a transzponált mátrix komplex konjugáltja:

$$[a] = \left([a^\dagger]^T \right)^*. \quad (31.37)$$

A (31.2), (31.3) összefüggések alapján így X és P mátrixa is meghatározható. Ezek voltak azok a mátrixok, amelyeket Heisenberg a harmonikus oszcillátor kvantumos vizsgálata során 1925-ben elsőként megtalált, s ez volt a modern kvantummechanika *mátrixmechanikának* nevezett változatának első eredménye.

31.1 Feladat: Mutassuk meg, hogy a koordináta- és az impulzus szórása az alapállapotban:

$$(\Delta X)_0^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad (\Delta P)_0^2 = \frac{m\omega\hbar}{2}.$$

31.2 Feladat: Számítsuk ki az X és P várható értékét és szórását az $|n\rangle$ stacionárius állapotban.


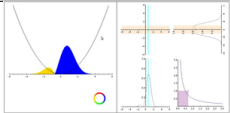

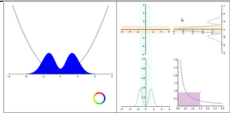

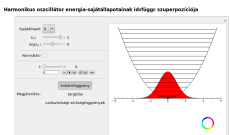
32. Nemstacionárius állapotok harmonikus potenciálban, koherens és préselt állapotok


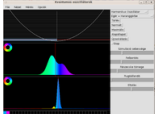
Miután megállapítottuk a kvantummechanikai harmonikus oszcillátor stacionárius állapotait, most már tetszőleges, az oszcillátor-potenciálban mozgó időfüggő állapot is fölírható. Ennek általános alakja:


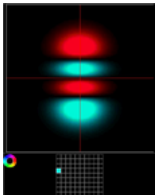
$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-i(n+1/2)\omega t} |n\rangle = e^{-i\omega t/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-in\omega t} |n\rangle \langle n|\Psi(0)\rangle, \quad (32.1)$$


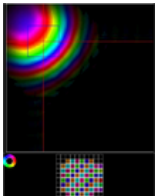
ahol $|\Psi(0)\rangle$ tetszőleges kezdőállapot, és így $c_n = \langle n|\Psi(0)\rangle$.


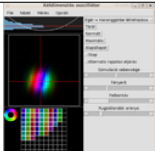
A következő oldalon oszcillátor potenciálban történő mozgásokat mutatunk be. Különböző speciális kezdőállapotokból kiindulva a hullámfüggvény időbeli változása követhető nyomon:

HARMONIKUS OSZCILLÁTOR: IDŐFÜGGŐ SZUPERPOZÍCIÓ		
		Az animáció az egydimenziós harmonikus oszcillátor $\frac{1}{\sqrt{2}}(0\rangle + 1\rangle)$ állapotának időbeli változását mutatja meg.
		Az animáció az egydimenziós harmonikus oszcillátor $\frac{1}{\sqrt{2}}(0\rangle + 2\rangle)$ állapotának időbeli változását mutatja meg.
		Az interaktív animáció segítségével az egydimenziós harmonikus oszcillátor energia-sajátállapotainak szuperpozícióit hozhatjuk létre, majd a normálás után az így létrehozott kvantumállapot időbeli változását vizsgálhatjuk, lásd a (32.1) formulát.

OSZCILLÁTOR JELLEGŰ POTENCIÁLOKBAN MOZGÓ RÉSZECSCKE		
		Ez a java applet egydimenziós, oszcillátor jellegű potenciálokban mozgó kvantumos részecske dinamikáját mutatja. A harmonikus oszcillátornál szokásos – a kitérés második hatványával arányos – potenciális energia mellett beállíthatunk a kitérés negyedik hatványával arányos potenciális energiát is. A további magyarázatokat és beállítási lehetőségeket illetően olvassuk el a „Részletes leírás”-t. RÉSZLETES LEÍRÁS

KÉTDIMENZIÓS HARMONIKUS OSZCILLÁTOR STACIONÁRIUS ÁLLAPOTA		
		A fázis időbeli változása kétdimenziós harmonikus oszcillátor potenciálban $n_1 = 0$, $n_2 = 3$ sajátállapotában (azaz a videón a vízszintes irány szerint alapállapotról, míg függőlegesen a harmadik gerjesztett állapotról van szó.) A színekódolás az alsó panel bal sarkában található, a komplex egységkörnek megfelelő ábráról olvasható le. A kis négyzetek a sajátállapotok betöltési valószínűségének és fázisának a szemléltetésére szolgálnak, esetünkben az egyetlen változó színű négyzet azt jelzi, hogy a rendszer egységnyi valószínűséggel a fenti sajátállapotban van.

HULLÁMCSOMAG MOZGÁSA KÉTDIMENZIÓS HARMONIKUS OSZCILLÁTOR-POTENCIÁLBAN		
		Hullámcsomag terjedése, szétfolyása majd újraegyesülése kétdimenziós harmonikus oszcillátor potenciálban. A színekódolás az alsó panel bal sarkában található, a komplex egységkörnek megfelelő ábráról olvasható le. A kis négyzetek a sajátállapotok betöltési valószínűségének és fázisának a szemléltetésére szolgálnak, a hullámcsomagot adó szuperpozícióban maga a szín az adott állapot időfüggő fázisát, míg a fekete felé csökkenő intenzitás az amplitúdót kódolja.

KÉTDIMENZIÓS HARMONIKUS OSZCILLÁTOR		
		Ez a java applet kétdimenziós harmonikus potenciálban mozgó kvantumos részecske dinamikáját mutatja. A további magyarázatokat és beállítási lehetőségeket illetően olvassuk el a „Részletes leírás”-t. RÉSZLETES LEÍRÁS

32.1. Koherens állapotok

Tekintsünk most speciálisan egy olyan – szokásosan $|\alpha\rangle$ -val jelölt – normált kezdőállapotot, amelyben a koordináta és az impulzus várható értéke x_0 illetve p_0 , ugyanakkor pedig mind a koordináta, mind az impulzus szórása ugyanannyi, mint a $|0\rangle$ jelzésű alapállapotban. Az előírás tehát

$$\langle\alpha|X|\alpha\rangle = x_0, \quad \langle\alpha|P|\alpha\rangle = p_0, \quad (32.2)$$

$$(\Delta X)_\alpha^2 = \langle\alpha|(X - x_0)^2|\alpha\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad (\Delta P)_\alpha^2 = \langle\alpha|(P - p_0)^2|\alpha\rangle = \frac{m\omega\hbar}{2}. \quad (32.3)$$

A keresett $|\alpha\rangle$ állapot tehát, csakúgy mint a $|0\rangle$ intelligens, mivel a szórások szorzata éppen a Heisenberg-egyenlőtlenség által megengedett minimális érték.

Egyszerűsödik a számolás, ha a dimenziótlan

$$\tilde{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger), \quad \tilde{P} = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}P = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) \quad (32.4)$$

koordináta- és impulzus operátorokat használjuk, amelyeket az előző szakasz alapján fejeztünk ki a -val és a^\dagger -al. Ezekkel

$$\langle\alpha|\tilde{X}|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle\alpha|a + a^\dagger|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x_0 =: \xi_0, \quad (32.5)$$

$$\langle\alpha|\tilde{P}|\alpha\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}\langle\alpha|a^\dagger - a|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}p_0 =: \eta_0, \quad (32.6)$$

ahol ξ_0 és η_0 a megfelelő dimenziótlan (koordináta- és impulzus) várható értékek. Szorozzuk (32.6)-ot $i/\sqrt{2}$ -vel és adjuk hozzá (32.5) $1/\sqrt{2}$ szeresét. Ekkor

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\langle\alpha|\tilde{X} + i\tilde{P}|\alpha\rangle = \langle\alpha|a|\alpha\rangle = \frac{\xi_0 + i\eta_0}{\sqrt{2}}. \quad (32.7)$$

Vezessük be az

$$\alpha = \frac{\xi_0 + i\eta_0}{\sqrt{2}} \quad (32.8)$$

komplex számot, amely nem azonos az $|\alpha\rangle$ állapottal, de azzal szoros kapcsolatban áll, mert az a operátor várható értéke éppen α az $|\alpha\rangle$ állapotban:

$$\langle\alpha|a|\alpha\rangle = \alpha. \quad (32.9)$$

Ugyanúgy, az adjungált operátorra az $\langle\alpha|a^\dagger|\alpha\rangle = \alpha^*$ áll fönn. Az α komplex szám valós része a koordináta, képzetes része pedig az impulzus várható értékével arányos az $|\alpha\rangle$ állapoton véve.

A szórásnégyzetekre az előírás szerint ekkor a

$$(\Delta\tilde{X})_\alpha^2 = \langle\alpha|\tilde{X}^2|\alpha\rangle - \xi_0^2 = \frac{1}{2}, \quad (32.10)$$

$$(\Delta\tilde{P})_\alpha^2 = \langle\alpha|\tilde{P}^2|\alpha\rangle - \eta_0^2 = \frac{1}{2} \quad (32.11)$$

egyenlőségeknek kell teljesülniük. Adjuk össze ezt a két egyenlőséget, és fejezzük ki itt az \tilde{X}^2 és \tilde{P}^2 operátorokat a -val és a^\dagger -al:

$$\begin{aligned} & (\Delta\tilde{X})^2 + (\Delta\tilde{P})^2 = \\ &= \frac{1}{2} \langle\alpha|(a + a^\dagger)^2 - (a^\dagger - a)^2|\alpha\rangle - \xi_0^2 - \eta_0^2 = 1. \end{aligned} \quad (32.12)$$

Végezzük el a négyzetre emeléseket, és vegyük figyelembe, az $aa^\dagger - a^\dagger a = 1$ kommutátort:

$$\langle \alpha | 2a^\dagger a + 1 | \alpha \rangle - 2\alpha\alpha^* = 1. \quad (32.13)$$

Mivel $|\alpha\rangle$ normált $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$, és $\langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle = \alpha\alpha^* = |\alpha|^2$, az

$$\langle \alpha | a^\dagger a - |\alpha|^2 | \alpha \rangle = 0 \quad (32.14)$$

föltételt kapjuk az $|\alpha\rangle$ állapotra.

Vezessünk be most a

$$b = a - \alpha, \quad b^\dagger = a^\dagger - \alpha^* \quad (32.15)$$

definícióval két új operátort. A $b^\dagger b$ operátor várható értéke az $|\alpha\rangle$ állapotban (32.9) és (32.14) figyelembe vételével:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | b^\dagger b | \alpha \rangle &= \langle \alpha | (a^\dagger - \alpha^*)(a - \alpha) | \alpha \rangle = \langle \alpha | (a^\dagger a - \alpha^* a - \alpha a^\dagger + |\alpha|^2) | \alpha \rangle = \\ &= \langle \alpha | (a^\dagger a - |\alpha|^2) | \alpha \rangle = 0. \end{aligned} \quad (32.16)$$

Az $\langle \alpha | b^\dagger b | \alpha \rangle = 0$ viszont éppen a $b | \alpha \rangle$ állapot norma-négyzete, amely akkor és csak akkor nulla, ha $b | \alpha \rangle = 0$, azaz $(a - \alpha) | \alpha \rangle = 0$. Ez másképpen az

$$a | \alpha \rangle = \alpha | \alpha \rangle \quad (32.17)$$

alakba írható, azaz a keresett $|\alpha\rangle$ állapotok éppen az a eltüntető operátor sajátállapotai. Noha a nem önadjungált, ezek a sajátállapotok – mint alább megmutatjuk – tetszőleges α -ra léteznek és normálhatók.

Keressük az $|\alpha\rangle$ állapotokat a teljes ortonormált rendszert alkotó $|n\rangle$ harmonikus oszcillátor sajátállapotok, vagy más néven *számállapotok* szuperpozíciójaként az

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle \quad (32.18)$$

alakban. Itt $c_n = \langle n | \alpha \rangle$. Írjuk vissza a kifejtést a (32.17) sajátérték-egyenletbe és használjuk az $a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$ léptető tulajdonságot:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \alpha c_n |n\rangle = a \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_{n+1} \sqrt{n+1} |n\rangle, \quad (32.19)$$

ahol az utolsó egyenlőségénél n helyett áttértünk az $n-1$ összegzőindexre. Emiatt

$$c_{n+1} = \frac{\alpha c_n}{\sqrt{n+1}}, \quad (32.20)$$

illetve

$$c_n = \frac{\alpha c_{n-1}}{\sqrt{n}} = \frac{\alpha^n c_0}{\sqrt{n!}}. \quad (32.21)$$

A normálási föltételből

$$1 = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = |c_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{\sqrt{n!}} = |c_0|^2 e^{|\alpha|^2}, \quad (32.22)$$

ahonnan $c_0 = e^{-|\alpha|^2/2}$, mivel c_0 -t konvenció szerint valósnak és pozitívnak választjuk. Eredményünk szerint tehát $c_n = \langle n | \alpha \rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \alpha^n / \sqrt{n!}$, s így a keresett állapot kifejtése a számállapotokon:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (32.23)$$

ahol α tetszőleges komplex szám. Ezeket az állapotokat a harmonikus oszcillátor *koherens* állapotainak nevezzük. A koherens állapotok tehát a komplex α számokkal indexelhetők, azaz az ilyen állapotok számossága nem megszámlálható. Ezeket az állapotokat koordinátareprezentáció segítségével először Schrödinger vezette be 1926-ban.

Felhívjuk a figyelmet még a következőkre. Az $|\alpha = 0\rangle$ koherens állapot azonos az $|n = 0\rangle$ számállapottal, amely éppen az oszcillátor alapállapota. Általában azonban az $|\alpha = k\rangle$ koherens állapot, ahol k éppen egész, nem azonos az $|n = k\rangle$ számállapottal. Ez a jelölés inkonzisztenciája, de ezt szinte egyöntetűen alkalmazzák az irodalomban, így mi is ehhez tartjuk itt magunkat.

32.1 Feladat: Igazoljuk fordított irányban, hogy ha a koherens állapotokat a (32.23) összefüggéssel definiáljuk, akkor ezek az a operátor sajátállapotai lesznek, α sajátértékkel.

32.2 Feladat: Igazoljuk, hogy a koordináta és az impulzus szórása tetszőleges $|\alpha\rangle$ állapotban megegyezik a $|0\rangle$ állapotban vett szórásokkal.

32.3 Feladat: Számítsuk ki az $|\alpha\rangle$ és $|\beta\rangle$ koherens állapot $\langle\alpha|\beta\rangle$ belső szorzatát.

A koherens állapotok időfejlődése a (32.1) általános képlet szerint:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= e^{-i\omega t/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-in\omega t} |n\rangle \langle n|\alpha\rangle = e^{-i\omega t/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-in\omega t} |n\rangle \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-|\alpha|^2/2} = \\ &= e^{-i\omega t/2} \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} e^{-|\alpha e^{-i\omega t}|^2/2} = |\alpha e^{-i\omega t}\rangle. \end{aligned} \quad (32.24)$$

Az az érdekes eredmény adódott tehát, hogy a kezdetben az α komplex számmal jelzett $|\alpha\rangle$ koherens állapot abba a szintén koherens állapotba kerül t idő múlva, amelyet az $\alpha e^{-i\omega t}$ komplex szám jelöl. Azaz az oszcillátor koherens állapota koherens marad az időfejlődés során. A valós és képzetes részeket illetően ezt a transzformációt az

$$\begin{aligned} \alpha e^{-i\omega t} &= \frac{\xi_0 + i\eta_0}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t} = \frac{1}{\sqrt{2}} [(\xi_0 \cos \omega t + \eta_0 \sin \omega t) + i(\eta_0 \cos \omega t - \xi_0 \sin \omega t)] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi(t) + i\eta(t)) \end{aligned} \quad (32.25)$$

képlet adja meg. Ebből a koordináta és az impulzus várható értékének időfejlődésére az $x(t) = \sqrt{\hbar/(m\omega)}\xi(t)$ és a $p(t) = \sqrt{m\omega\hbar}\eta(t)$ skálázás után az

$$x(t) = x_0 \cos \omega t + \frac{p_0}{m\omega} \sin \omega t, \quad (32.26)$$

$$p(t) = p_0 \cos \omega t - m\omega x_0 \sin \omega t \quad (32.27)$$

időfejlődés adódik, ami megegyezik a klasszikus harmonikus oszcillátor mozgásegyenletének megoldásával. Ez az utóbbi eredmény a koordináta és az impulzus várható értékére a harmonikus oszcillátorra valójában tetszőleges kezdőállapot esetén, tehát nem csak a $|\Psi(0)\rangle = |\alpha\rangle$ -ra teljesül, amint azt Ehrenfest tételeivel kapcsolatban a legfőbb kvadratikus potenciálokra általában is megmutattuk. Az X és P szórására ugyanilyen állandóság általános kezdőállapot esetén nem érvényes, de $|\Psi(0)\rangle = |\alpha\rangle$ esetén a fentiek szerint a szórások sem változnak időben, amint az közvetlen számítással is megmutatható.


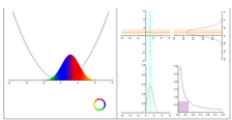

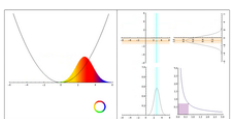

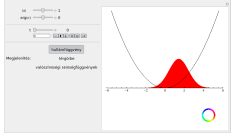
32.4 Feladat: Számítsuk ki közvetlenül az \tilde{X} és \tilde{P} szórását az $|\alpha e^{-i\omega t}\rangle$ állapotban.

A koherens állapot koordinátareprezentációban is megadható, ez legegyszerűbben az $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ sajátérték-egyenlet megfelelő alakjából kapható meg, hasonlóan ahhoz, ahogyan az alapállapotot megkaptuk az előző szakaszban a koordinátareprezentációban. Az alábbi animáción különböző koherens állapotok időfejlődését követhetjük nyomon.

32.5 Feladat: Mutassuk meg, hogy a koordinátareprezentáció alak az $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x_0 + i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}p_0$ komplex számmal jellemzett állapotban $\varphi_\alpha(x) = Ce^{-m\omega(x-x_0)^2/2\hbar}e^{ip_0x}$, ahol C ugyanaz a normálási állandó, ami az $x_0 = 0, p_0 = 0$ alapállapothoz is tartozik.

32.6 Feladat: Számítsuk ki az oszcillátor N operátorának várható értékét az $|\alpha\rangle$ állapotban.


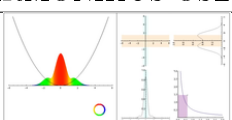

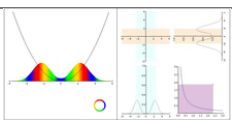

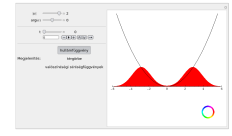
32.7 Feladat: Számítsuk ki N szórását az $|\alpha\rangle$ állapotban.

HARMONIKUS OSZCILLÁTOR: KOHERENS ÁLLAPOTOK		
		Az animáción a harmonikus oszcillátor $ \alpha = 1\rangle$ koherens állapotának időfejlődése látható. A hullámfüggvény abszolút értéke minden időpontban az alapállapottal azonos alakú, de ω körfrekvenciával rezeg az egyensúlyi helyzet körül $ \alpha $ -val arányos amplitúdóval.
		Az animáción a harmonikus oszcillátor $ \alpha = 2\rangle$ koherens állapotának időfejlődése látható. A hullámfüggvény abszolút értéke minden időpontban az alapállapottal azonos alakú, de ω körfrekvenciával rezeg az egyensúlyi helyzet körül $ \alpha $ -val arányos amplitúdóval.
		Az interaktív animáció segítségével az egydimenziós harmonikus oszcillátor energia-sajátállapotainak egy speciális szuperpozícióját vizsgálhatjuk, ez a koherens állapot, amit a (32.24) képlet szerint egy α komplex számmal jellemezhetünk. Ennek abszolút értéke minden időpontban az alapállapottal azonos alakú, de ω körfrekvenciával rezeg az egyensúlyi helyzet körül $ \alpha $ -val arányos amplitúdóval.

A harmonikus oszcillátor Schrödinger-macska állapotának szokás nevezni a két azonos abszolút értékű, de ellentétes előjelű α -hoz tartozó koherens állapotok szuperpozícióját:

$$|SC\rangle = (|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle)/\mathcal{N}. \quad (32.28)$$

Itt \mathcal{N} a megfelelő normálási tényező. Ilyen állapotok időfejlődését mutatják az alábbi animációk:

HARMONIKUS OSZCILLÁTOR: SCHRÖDINGER-MACSKA ÁLLAPOTOK		
		Az animáción a harmonikus oszcillátor $\alpha = 1$ -hez tartozó Schrödinger-macska állapotának időfejlődését láthatjuk.
		Az animáción a harmonikus oszcillátor $\alpha = 2$ -höz tartozó Schrödinger-macska állapotának időfejlődését láthatjuk.
		Az interaktív animáció segítségével az egydimenziós harmonikus oszcillátor két koherens állapotának egy érdekes szuperpozícióját vizsgálhatjuk, ez a Schrödinger-macska állapot (Schrödinger-cat state), ami két koherens állapot normált szuperpozíciója: $ SC\rangle = (\alpha\rangle + -\alpha\rangle)/\mathcal{N}$, így ezt is az α komplex számmal jellemezhetjük.

32.2. Préselt koherens állapotok


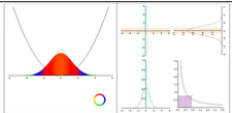

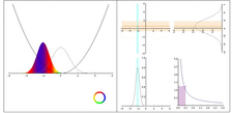

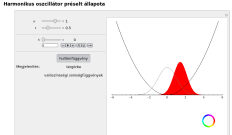
A harmonikus oszcillátor állapotai közül azok lehetséges érdekes alkalmazásai miatt különös figyelmet kaptak az 1980-as évek közepétől kezdve azok, amelyek a koherens állapotokhoz hasonlóan

minimalizálják a Heisenberg-egyenlőtlenséget, tehát intelligensek, ám ugyanakkor az X és P szórása közül az egyik kisebb, mint a $|0\rangle$ jelű alapállapotban. A Heisenberg-egyenlőtlenségnek viszont teljesülnie kell, tehát ilyenkor a másik mennyiség szórása viszont nagyobb, mint az alapállapot értéke. A kérdéses úgynevezett *préselt koherens*, vagy röviden préselt állapotokat itt $|\zeta\rangle$ -val fogjuk jelölni. Angolul ezeket *squeezed* állapotoknak nevezzük. A dimenziótlan \tilde{X} és \tilde{P} operátorok szórásnégyzeteire a $\langle\zeta|\tilde{X}|\zeta\rangle = \xi_0$, $\langle\zeta|\tilde{P}|\zeta\rangle = \eta_0$ jelölésekkel ekkor a

$$(\Delta\tilde{X})_\zeta^2 = \langle\zeta|\tilde{X}^2|\zeta\rangle - \xi_0^2 = \frac{r}{2}, \quad (32.29)$$

$$(\Delta\tilde{P})_\zeta^2 = \langle\zeta|\tilde{P}^2|\zeta\rangle - \eta_0^2 = \frac{1}{2r} \quad (32.30)$$

föltételek teljesülését kívánjuk meg, ahol r egy pozitív szám. Ha $r < 1$, akkor azt mondjuk, hogy a koordináta préselt és az impulzus nyújtott, míg ha $r > 1$, akkor az impulzus préselt és a koordináta nyújtott. Az $r = 1$ felel meg a fentebb látott koherens állapotnak. A préselt állapotok is kifejezhetők a számállapotok szerint, de ezt itt nem részletezzük, csak a $|\zeta\rangle$ állapotok időfejlődéséről mutatunk be alább animációt. A számítás szerint az időfejlődés során az r változik és az oszcillátor $2\pi/\omega$ periódusa alatt kétszer lesz 1-nél kisebb illetve nagyobb tehát az időfejlődés során az X és a P váltakozva lesz préselt illetve nyújtott.

HARMONIKUS OSZCILLÁTOR: PRÉSELT KOHERENS ÁLLAPOTOK		
		A harmonikus oszcillátor préselt alapállapota. Itt az állapot szórása is harmonikusan változik az alapállapot szórása körül 2ω frekvenciával.
		A harmonikus oszcillátor préselt koherens állapota. A koordináta várható értéke a szokásos ω körfrekvenciájú harmonikus rezgést végzi, miközben az állapot szórása az alapállapot értéke körül 2ω körfrekvenciával oszcillál.
		Az interaktív animáció segítségével az egydimenziós harmonikus oszcillátor energia-sajátállapotainak egy nevezetes szuperpozícióját vizsgálhatjuk, ez a préselt (v. összenyomott) állapot (az angol nyelvű szakirodalomban: squeezed state), amit egy r valós számmal és egy α komplex számmal jellemezhetünk.

33. Az impulzusnyomaték algebrai elmélete

Egy pontszerű részecske impulzusnyomatéka klasszikusan $\vec{\mathcal{L}} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Egy zárt részecskerendszer esetén a teljes rendszer impulzusnyomatéka megmarad. Ismeretes azonban a klasszikus mechanikából, hogy vannak esetek amikor, az impulzusnyomaték megmarad akkor is, ha a rendszer nem zárt. Ilyen például a centrális erőterben mozgó tömegpont esete.

A fenti klasszikus $\vec{\mathcal{L}}$ mennyiségnek megfelelő kvantumos impulzusnyomatékot úgy kapjuk, hogy az $\mathbf{r} \times \mathbf{p}$ vektori szorzatban a megfelelő operátorokkal helyettesítjük a klasszikus mennyiségeket, s nyerjük ezáltal a pályaimpulzusnyomaték operátorát:

$$\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}. \quad (33.1)$$

Ennek a vektornak három komponense van, amelyeket tömören az

$$L_i = \epsilon_{ijk} X_j P_k \quad (33.2)$$

formula ad meg, (ahol ϵ_{ijk} a Lévi-Civita szimbólum, és a kétszer előforduló indexekre összegezni kell). Azaz részletezve:

$$L_x = YP_z - ZP_y, \quad L_y = ZP_x - XP_z, \quad L_z = XP_y - YP_x. \quad (33.3)$$

Az \mathbf{R} és \mathbf{P} komponensei között fennálló kanonikus fölcserélési relációk alapján az impulzusnyomaték komponenseire a következő fölcserélési relációt nyerjük :

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k. \quad (33.4)$$

33.1 Feladat: Mutassuk meg a (33.4) összefüggés érvényességét.

Az impulzusnyomaték fogalmát most általánosítjuk, és a kvantummechanikai impulzusnyomatékot éppen a fölcserélési reláció alapján definiáljuk. Eszerint a kvantummechanikai impulzusmomentumnak legáltalánosabban egy olyan $\mathbf{J} = \{J_x, J_y, J_z\}$ lineáris és önadjungált operátorhármast nevezünk, amelynek komponensei a

$$[J_i, J_k] = i\hbar\epsilon_{ikl}J_l \quad (33.5)$$

fölcserélési relációknak tesznek eleget. Ennek, és a (33.4) eredménynek az alapján nyilvánvaló, hogy a főntebb $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$ -vel definiált mennyiség impulzusmomentum. De látható, hogy \mathbf{J} bevezetésével itt elvonatkoztattunk az $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$ alaktól, és ez utóbbi tulajdonságai közül csak a fölcserélési relációt tartottuk meg. Ennek oka többek között az, hogy – mint kiderült – a kvantummechanikában van a térbeli mozgáshoz nem kapcsolódó belső impulzusmomentum, sajátperdület is, amelyet *spinnek* nevezünk (lásd a korábban tárgyalt Stern-Gerlach-kísérletet). Ez hasonlít a klasszikus fizikában valamely saját tengely körül forgó merev test sajátperdületéhez, például egy forgó labdáéhoz. Noha ez a hasonlat a kvantummechanika szerint távolról sem tökéletes, mégis valami ilyen jellegű forgásra lehet gondolni a spin hallatán. Fölhívjuk a figyelmet, hogy sem az impulzusmomentum, sem a spin nem keverendő egy másfajta mennyiséggel, a mágneses momentummal. Igaz viszont, hogy töltött részecskék impulzusmomentumához és spinjéhez általában azzal arányos mágneses momentum csatolódik, és ezért a spin, azaz a mechanikai perdület mérését a kapcsolódó mágneses momentum mérésére vezetik vissza. Az elektron sajátimpulzusmomentuma, azaz spinje nem értelmezhető az \mathbf{L} segítségével, az általánosabb, csak a \mathbf{J} komponenseire vonatkozó fölcserélési reláció előírásával viszont mindenfajta impulzusmomentum, pl. az elektron úgynevezett feles spinje is értelmezhető.

Egyszerűen bizonyítható, hogy a $\mathbf{J}^2 = J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ operátor bármely J_k komponenssel fölcserélhető:

$$[J^2, J_k] = 0, \quad k = x, y, z. \quad (33.6)$$

33.2 Feladat: Bizonyítsuk be a (33.6) összefüggést.

A fölcserélhető önadjungált operátorok közös sajátvektorainak létezéséről szóló tétel szerint, (20. szakasz) kereshető közös sajátvektorrendszere J^2 -nek és J_z -nek. A J^2 operátor várható értéke minden állapotban nemnegatív, ezért sajátértékei is nemnegatívak.

A dimenziókat figyelembe véve a sajátérték-egyenletek alakja:

$$J^2 |\varphi_{\lambda,m}\rangle = \hbar^2 \lambda^2 |\varphi_{\lambda,m}\rangle, \quad (33.7)$$

$$J_z |\varphi_{\lambda,m}\rangle = m\hbar |\varphi_{\lambda,m}\rangle, \quad (33.8)$$

ahol λ^2 nemnegatív valós szám, m valós szám. Egyszerűen adódik, hogy

$$m^2 \leq \lambda^2, \quad (33.9)$$

azaz

$$-\lambda \leq m \leq \lambda. \quad (33.10)$$

33.3 Feladat: Mutassuk meg a $\langle \varphi_{\lambda,m} | J^2 | \varphi_{\lambda,m} \rangle$ kifejezés kifejtésével a (33.9) relációt.

Vezessük be a

$$J_+ = J_x + iJ_y, \quad J_- = J_x - iJ_y \quad (33.11)$$

operátorokat. J^2 nyilvánvalóan ezekkel is fölcserélhető, s így

$$J^2 J_\pm |\varphi_{\lambda,m}\rangle = J_\pm J^2 |\varphi_{\lambda,m}\rangle = \hbar^2 \lambda^2 J_\pm |\varphi_{\lambda,m}\rangle. \quad (33.12)$$

Azaz J_+ és J_- nem vezetnek ki J^2 -nek egy adott λ^2 -el, azaz egy $\lambda \geq 0$ számmal indexelt sajátaltéréből. Nem ez a helyzet viszont J_z esetén mert, mint egyszerűen megmutatható:

$$[J_z, J_\pm] = \pm \hbar J_\pm, \quad (33.13)$$

így

$$J_z J_\pm |\varphi_{\lambda,m}\rangle = (J_\pm J_z \pm \hbar J_\pm) |\varphi_{\lambda,m}\rangle = \hbar(m \pm 1) J_\pm |\varphi_{\lambda,m}\rangle. \quad (33.14)$$

33.4 Feladat: Igazoljuk a (33.13) relációt.

A (33.14) egyenlőségből az következik, hogy vagy $J_\pm |\varphi_{\lambda,m}\rangle$ is sajátvektora J_z -nek $m \pm 1$ sajátértékkel, vagy a zéró vektor. Egyszerűen látható, hogy $J_\pm^k |\varphi_{\lambda,m}\rangle$, ahol k egész, szintén vagy sajátvektor $m \pm k$ sajátértékkel, vagy a zéró vektor. Adott λ esetén (amelyet mint láttuk J_\pm nem változtat) azonban $-\lambda \leq m \leq \lambda$, amiből következik, hogy kell lennie egy olyan maximális és minimális m_+ illetve m_- valós számnak, amelyre a megfelelő $|\varphi_{\lambda,m_\pm}\rangle$ (a definíció szerint nem 0) sajátvektorok azaz:

$$J_z |\varphi_{\lambda,m_\pm}\rangle = m_\pm \hbar |\varphi_{\lambda,m_\pm}\rangle, \quad (33.15)$$

azonban

$$J_+ |\varphi_{\lambda,m_+}\rangle = 0, \quad J_- |\varphi_{\lambda,m_-}\rangle = 0. \quad (33.16)$$

Most megállapítjuk m_+ és m_- kapcsolatát, illetve m lehetséges értékeit. Tekintsük ehhez a

$$J_+ J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z, \quad (33.17)$$

$$J_- J_+ = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z \quad (33.18)$$

összefüggéseket, amelyek kiírással egyszerűen láthatók. Ezekből:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \varphi_{\lambda,m_+} | J_- J_+ | \varphi_{\lambda,m_+} \rangle = \langle \varphi_{\lambda,m_+} | J^2 - J_z^2 - \hbar J_z | \varphi_{\lambda,m_+} \rangle = \\ &= \hbar^2 (\lambda^2 - m_+^2 - m_+) \langle \varphi_{\lambda,m_+} | \varphi_{\lambda,m_+} \rangle, \end{aligned} \quad (33.19)$$

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \varphi_{\lambda,m_-} | J_+ J_- | \varphi_{\lambda,m_-} \rangle = \langle \varphi_{\lambda,m_-} | J^2 - J_z^2 + \hbar J_z | \varphi_{\lambda,m_-} \rangle = \\ &= \hbar^2 (\lambda^2 - m_-^2 + m_-) \langle \varphi_{\lambda,m_-} | \varphi_{\lambda,m_-} \rangle. \end{aligned} \quad (33.20)$$

Mivel $|\varphi_{\lambda,m_\pm}\rangle$ sajátvektorai J_z -nek, ezért nem a nulla vektorok, tehát az önmagukkal vett belső szorzatuk sem 0, így az előttük álló tényezőnek el kell tűnnie:

$$\lambda^2 - m_+^2 - m_+ = 0, \quad (33.21)$$

$$\lambda^2 - m_-^2 + m_- = 0. \quad (33.22)$$

A két egyenlet különbségének bal oldalát szorzattá alakíthatjuk:

$$(m_+ + m_-)(m_+ - m_- + 1) = 0, \quad (33.23)$$

amiből vagy az következik, hogy $m_+ = -m_-$ vagy az, hogy $m_- = m_+ + 1$. Az utóbbi viszont nem lehetséges, mert föltettük, hogy m_+ a legnagyobb sajátérték, tehát m_- nem lehet nála nagyobb. Marad tehát az

$$m_+ = -m_- =: j \quad (33.24)$$

lehetőség, ahol a fönti összefüggéssel definiáltuk a j számot, amely adott λ esetén tehát a legnagyobb sajátértéke J_z -nek. (33.21)-ből az is következik, hogy

$$\lambda^2 = m_+(m_+ + 1) = j(j + 1). \quad (33.25)$$

Az előzőek szerint egy m -el jellemzett $|\varphi_{\lambda,m}\rangle$ sajátvektorból indulva és J_+ -t, illetve J_- -t alkalmazva p -szer, illetve q -szor, léteznek olyan vektorok, amelyek a J_z -nek az

$$m, m + 1, \dots, m + p = m_+ = j, \quad (33.26)$$

$$m, m - 1, m - q = m_- = -j \quad (33.27)$$

\hbar -al szorzott sajátértékeihez tartoznak, ahol p, q értelemszerűen egész számok. Az $m + p = m_+ = j$, és az $m - q = m_- = -j$ összefüggések különbségéből:

$$j = \frac{p + q}{2}. \quad (33.28)$$

Ebből a j kvantumszám lehetséges értékeire azt kapjuk, hogy

$$j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots \quad (33.29)$$

Az is látható ebből, hogy adott j kvantumszámhoz a következő $2j + 1$ darab m tartozik

$$j, j - 1, \dots, -j + 1, -j. \quad (33.30)$$

Eredményünk tehát, ha a sajátvektorok indexelésére a λ helyett a j -t használjuk és a

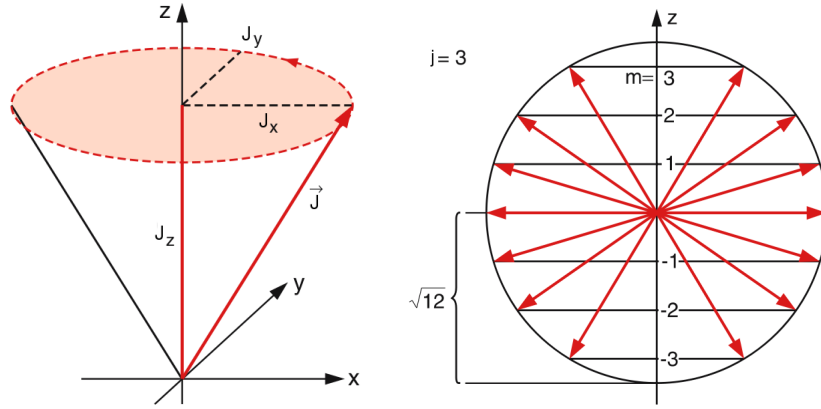
$$|\varphi_{j,m}\rangle =: |j, m\rangle \quad (33.31)$$

jelölést alkalmazzuk a következő:

$$J^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j + 1) |j, m\rangle, \quad (33.32)$$

$$J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle. \quad (33.33)$$

Megjegyezzük, hogy J^2 és J_z általában nem alkotnak CSCO-t, azaz van, vagy vannak további kvantumszámok, amelyek j és m mellett még szükségesek ahhoz, hogy egy kvantumállapotot valamely Hilbert-térben egyértelműen jellemezzünk. Másképpen szólva, adott j és m esetén a $|j, m\rangle$ állapotok között egy vagy több további fizikai mennyiség operátora különbséget tehet, vagyis ebből a szempontból az állapotok degeneráltak. Egy jól meghatározott állapot ilyenkor $|k, j, m\rangle$ alakú, ahol k utal a további J^2 -tel és J_z -vel fölcserélhető mennyiség(ek) sajátértékeire. Adott j esetén viszont az m szerinti degeneráció $2j + 1$ -szeres.



11. ábra. Az impulzusmomentum hossza és a vetületek viszonya a kvantummechanikában. Ha a J_z vetület, azaz az m kvantumszám adott, akkor a J_x és J_y vetületeknek nincs határozott értéke. Adott j esetén pedig a J_z vetület $2j + 1$ -szeresen degenerált.

Most megállapítjuk J_z , J_+ , J_- mátrixelemeit egy adott j és az $m = j \dots -j$ esetén a $2j + 1$ dimenziós tér $|j, m\rangle$ bázisában. Az előzőek szerint ebben a bázisban, amely J^2 sajátvektoraiból áll, a J^2 mátrixa diagonális, és minden sajátérték azonos $\hbar^2 j(j + 1)$. J_z mátrixa szintén diagonális és a $\hbar m$ különböző értékeit tartalmazza $m = j$ -től $m = -j$ -ig. Az előzőek szerint:

$$J_+ |j, m\rangle = c_+ |j, m + 1\rangle, \quad (33.34)$$

$$J_- |j, m\rangle = c_- |j, m - 1\rangle, \quad (33.35)$$

és keressük c_+ -t illetve c_- -t úgy, hogy $|j, m\rangle$ -el együtt $|j, m + 1\rangle$ és $|j, m - 1\rangle$ is normált legyen. Ekkor

$$\begin{aligned} \langle j, m | J_- J_+ |j, m\rangle &= \langle j, m | J^2 - J_z^2 - \hbar J_z |j, m\rangle = \hbar^2(j(j + 1) - m^2 - m) \langle j, m | j, m\rangle \\ &= |c_+|^2 \langle j, m + 1 | j, m + 1\rangle. \end{aligned} \quad (33.36)$$

Ha előírjuk a normálást, akkor $c_+ = \hbar \sqrt{j(j + 1) - m(m + 1)}$. Hasonlóan c_- -ra $J_+ J_-$ várható értékét számolva kapjuk, hogy $c_- = \hbar \sqrt{j(j + 1) - m(m - 1)}$, azaz

$$J_+ |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j + 1) - m(m + 1)} |j, m + 1\rangle, \quad (33.37)$$

$$J_- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j + 1) - m(m - 1)} |j, m - 1\rangle. \quad (33.38)$$

Ezekből J_x illetve J_y mátrixa is meghatározható, a (33.11)-ből következő $J_x = (J_+ + J_-)/2$ és $J_y = (J_+ - J_-)/2i$ formulákból. A $j = 1/2$ esetben, amelyet *feles spinű* esetnek nevezünk, ezekből a képletekből az $m = 1/2$, $m = -1/2$ sorrendben írva a mátrixelemeket a

$$J_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_x, \quad J_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_y, \quad (33.39)$$

$$J_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z \quad (33.40)$$

mátrixokat kapjuk, ahol a $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ mátrixok az úgynevezett Pauli-mátrixok. Megjegyezzük még, hogy a $j = 1/2$ esetben a megfelelő impulzusmomentum operátorokat $\mathbf{S} = \{S_x, S_y, S_z\}$ -vel is szoktuk jelölni a spinre való utalással.

Wolfgang Pauli (1900-1958)

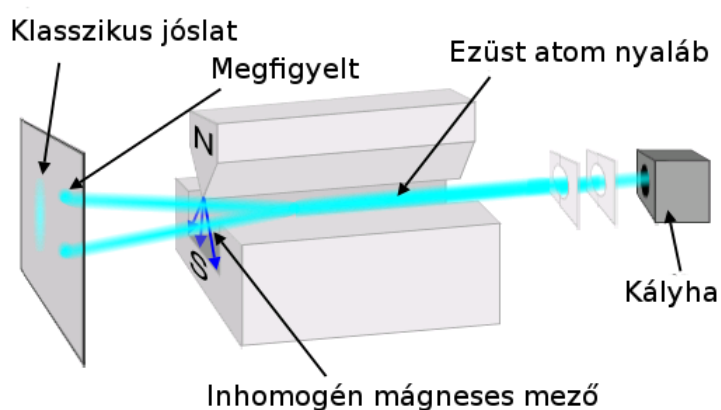


12. ábra.

33.5 Feladat: Mutassuk meg, hogy $j = 1/2$ esetén valóban a fenti (33.39,33.40) Pauli-mátrixok adódnak J_x, J_y, J_z -re.

33.6 Feladat: Írjuk föl $j = 1$ esetén a J_+, J_-, J_z, J_x, J_y mátrixokat.

34. Stern-Gerlach-kísérlet, feles spin sajátállapotai tetszőleges irányban



13. ábra. Stern-Gerlach-kísérlet sematikus ábrája

Azt a kérdést vizsgáljuk, hogy egy \mathbf{n}_1 irányú Stern-Gerlach berendezésből kijövő részecskék egy \mathbf{n} irányú inhomogén mágneses térrel (\mathbf{B}) jellemzett berendezés egyes kimenő csatornáiba milyen valószínűségi amplitúdókkal érkeznek. Itt csak a feles spinnel, azaz pl. az ezüstatomok esetével foglalkozunk. Legyen \mathbf{n}_1 iránya a z irány. Az ezüstatomoknak mágneses nyomatékuk van, potenciális energiájuk az elektrodinamikából ismeretesen $W = -\mathbf{m}\mathbf{B}$. Az \mathbf{m} mágneses nyomaték arányos a \mathbf{J} mechanikai nyomatékkal, amelyet ebben a $j = 1/2$ esetben \mathbf{S} -el jelölünk, utalva a spinre. A

mágneses dipólusra erő hat, amelyet a $\mathbf{F} = -\nabla W$ képlet alapján számolhatunk ki. E szerint

$$\mathbf{F} = \nabla(\mathbf{mB}) = \gamma \nabla(\mathbf{SB}). \quad (34.1)$$

Itt \mathbf{m} állandó, és ha \mathbf{B} is az, akkor $\mathbf{F} = 0$. Homogén térben tehát nem hat erő a mágneses nyomatékkal bíró részecskére. Ha viszont a \mathbf{B} inhomogén, és az inhomogenitás fő iránya az \mathbf{n} irány, azaz ebben az irányban változik leggyorsabban a mágneses mező, akkor $\mathbf{F} = \nabla(\mathbf{mB}) = \gamma \mathbf{Sn} \frac{\partial}{\partial n} B_n$.

Meg fogjuk keresni az \mathbf{n} egységvektor irányába eső spinvetület, azaz az $\mathbf{Sn} = S_n$ sajátértékeit és sajátvektorait, tehát az

$$\mathbf{Sn} |\varphi_n\rangle = \frac{\hbar}{2} \mu |\varphi_n\rangle \quad (34.2)$$

egyenlet megoldását, ahol a sajátértékből kiemeljük a $\hbar/2$ -t, így μ dimenziótlán. A $|\varphi_n\rangle$ -t abban a $|j = 1/2, m = 1/2\rangle = |z, +\rangle$, $|j = 1/2, m = -1/2\rangle = |z, -\rangle$ bázisban keressük, amelyben S_z diagonális. Tehát a

$$|\varphi_n\rangle = \alpha_n |z, +\rangle + \beta_n |z, -\rangle \quad (34.3)$$

kifejtésben az α_n és β_n együtthatókat határozzuk meg. A sajátérték-egyenlet:

$$\mathbf{Sn} |\varphi_n\rangle = S_n(\alpha_n |z, +\rangle + \beta_n |z, -\rangle) = \frac{\hbar}{2} \mu (\alpha_n |z, +\rangle + \beta_n |z, -\rangle) \quad (34.4)$$

szorozzuk előbb $|z, +\rangle$ -al, majd $|z, -\rangle$ -al és használjuk az ortogonalitást. Ekkor éppen az \mathbf{Sn} operátor $|z, +\rangle$, $|z, -\rangle$ bázisban vett mátrixának sajátértékegyenletét kapjuk. Ez a mátrix a (33)-ban megadott mátrixok alapján az $\mathbf{n} = \{n_x, n_y, n_z\}$ komponensekkel, illetve gömbi koordinátákat használva az $\mathbf{n} = \{\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta\}$ miatt

$$\mathbf{Sn} = S_x n_x + S_y n_y + S_z n_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} n_z & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & -n_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (34.5)$$

alakú. A sajátérték-egyenlet tehát a választott bázisban:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \mu \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (34.6)$$

ahol az n indexet mostantól nem írjuk ki az együtthatók mellé. A sajátértékekre $\mu = \pm 1$, a megfelelő normált ($|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$) sajátvektorokra pedig

$$\mu = 1 : \quad e^{i\delta_+} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad \mu = -1 : \quad e^{i\delta_-} \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (34.7)$$

adódik, ahol δ_+ és δ_- tetszőleges fázisok. Gyakori választás a $\delta_+ = \delta_- = -\phi/2$, vagy a $\delta_+ = \delta_- = 0$. Azaz a két – ortogonális – sajátvektor a $|z, \pm\rangle$ bázisban az utóbbi választással

$$|n, +\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |z, +\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} |z, -\rangle, \quad (34.8)$$

$$|n, -\rangle = -\sin \frac{\theta}{2} |z, +\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi} |z, -\rangle, \quad (34.9)$$

Ezekből ki lehet fejezni az S_z operátor $|z, +\rangle$ és $|z, -\rangle$ sajátvektorait:

$$|z, +\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |n, +\rangle - \sin \frac{\theta}{2} |n, -\rangle, \quad (34.10)$$

$$|z, -\rangle = \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} |n, +\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} |n, -\rangle. \quad (34.11)$$

A fönti egyenletekből megállapítható, hogy egymáshoz képest elforgatott Stern-Gerlach berendezéseken át milyen $\langle n, +|z, +\rangle$ stb. amplitúdókkal, illetve valószínűségekkel mennek át a feles spinű részecskék.

34.1 Feladat: Határozzuk meg a z irányú berendezés után elhelyezett x illetve y irányú berendezésén való áthaladási amplitúdókat és valószínűségeket.

34.2 Feladat: Mik az amplitúdók ha az első berendezés n_1 a második n_2 irányú?

34.3 Feladat: Keressük meg az amplitúdókat a $j = 1$ spin esetére.

35. Pályaimpulzusnyomaték, gömbi harmonikusok

Az alkalmazások szempontjából nagyon fontosak a pályaimpulzusmomentum koordinátareprezentációban kiszámított sajátvektorai. Mint azt a 33. szakaszban láttuk, az

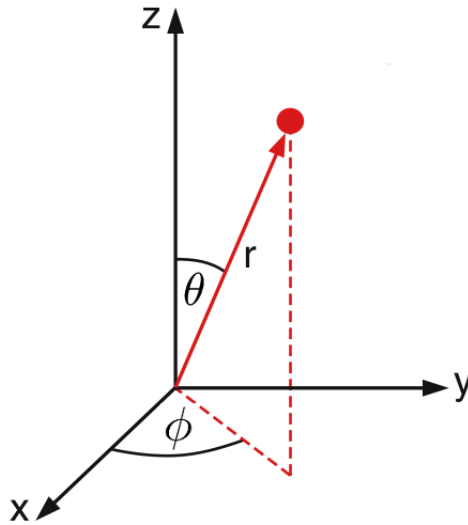
$$\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P} \quad (35.1)$$

vektor komponensei teljesítik az $[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$ kommutációs relációkat, hiszen ennek alapján általánosítottuk az impulzusmomentum definícióját a \mathbf{J} vektor komponenseire. Emiatt az ott kapott eredményeket itt is használhatjuk.

Tekintsük most koordinátareprezentációban az

$$\hat{L}_x = -i\hbar(y\partial_z - z\partial_y) \quad (35.2)$$

stb. pályaimpulzusmomentum operátorokat.



14. ábra. Gömbi polárkoordináták

Ki fog derülni, hogy ezek alakja egyszerűbb az r, θ, ϕ gömbi koordináták használatakor, mert a három derékszögű koordináta x, y és z helyett csak két gömbi koordináta, a θ polárszög és a ϕ azimutszög szerepel a kifejezésükben, a radiális koordináta r nem. Ennek mélyebb oka, hogy az impulzusnyomaték komponensei a forgatásokkal vannak kapcsolatban, ezért a r -et nem változtatják. A gömbi koordinátákba történő transzformációt elvégezhetjük a deriváltak transzformációjával, de gyorsabban érünk célra a következő módon. Írjuk föl egy pont helyvektorát a gömbi koordinátákkal és derékszögű egységvektorokkal.

$$\mathbf{r} = x \hat{\mathbf{e}}_x + y \hat{\mathbf{e}}_y + z \hat{\mathbf{e}}_z = r \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{e}}_x + r \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{e}}_y + r \cos \theta \hat{\mathbf{e}}_z. \quad (35.3)$$

A megfelelő görbevonali egységvektorok $\hat{\mathbf{e}}_i = \frac{1}{h_i} \partial_{q_i} \mathbf{r}$ ($i = r, \theta, \phi$), ahol a $h_i = |\partial_{q_i} \mathbf{r}|$ együtthatók a normálást biztosítják. A fenti kifejezésből a deriváltak és a normálás ($h_r = 1, h_\theta = r, h_\phi = r \sin \theta$) után kapjuk a görbevonali egységvektorokat:

$$\hat{\mathbf{e}}_r = \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{e}}_x + \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{e}}_y + \cos \theta \hat{\mathbf{e}}_z = \mathbf{r}/r, \quad (35.4)$$

$$\hat{\mathbf{e}}_\theta = \cos \theta \cos \phi \hat{\mathbf{e}}_x + \cos \theta \sin \phi \hat{\mathbf{e}}_y - \sin \theta \hat{\mathbf{e}}_z, \quad (35.5)$$

$$\hat{\mathbf{e}}_\phi = -\sin \phi \hat{\mathbf{e}}_x + \cos \phi \hat{\mathbf{e}}_y. \quad (35.6)$$

Jól ismert, de közvetlenül is meggyőződhetünk róla, hogy ezek páronként ortogonálisak egymásra, és $\hat{\mathbf{e}}_r \times \hat{\mathbf{e}}_\theta = \hat{\mathbf{e}}_\phi$, $\hat{\mathbf{e}}_r \times \hat{\mathbf{e}}_\phi = -\hat{\mathbf{e}}_\theta$, stb. A pályaimpulzusmomentum alakja koordinátareprezentációban:

$$\mathbf{L} = -i\hbar(\mathbf{r} \times \nabla). \quad (35.7)$$

Itt $\mathbf{r} = r\hat{\mathbf{e}}_r$, a ∇ gradiens ortogonális görbevonali koordinátás alakja pedig:

$$\nabla = \sum_i \hat{\mathbf{e}}_i \frac{1}{h_i} \frac{\partial}{\partial q_i} = \hat{\mathbf{e}}_r \partial_r + \hat{\mathbf{e}}_\theta \frac{1}{r} \partial_\theta + \hat{\mathbf{e}}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi. \quad (35.8)$$

Így az impulzusmomentum alakja a vektori szorzatokkal:

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= -i\hbar r (\hat{\mathbf{e}}_\phi \frac{1}{r} \partial_\theta - \hat{\mathbf{e}}_\theta \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi) = \\ &= -i\hbar \left\{ (-\sin \phi \hat{\mathbf{e}}_x + \cos \phi \hat{\mathbf{e}}_y) \partial_\theta - (\cos \theta \cos \phi \hat{\mathbf{e}}_x + \cos \theta \sin \phi \hat{\mathbf{e}}_y - \sin \theta \hat{\mathbf{e}}_z) \frac{1}{\sin \theta} \partial_\phi \right\}. \end{aligned} \quad (35.9)$$

Összegyűjtve az $\hat{\mathbf{e}}_x, \hat{\mathbf{e}}_y, \hat{\mathbf{e}}_z$ együtthatóit kapjuk, hogy

$$\hat{L}_x = i\hbar(\sin \phi \partial_\theta + \cot \theta \cos \phi \partial_\phi), \quad (35.10)$$

$$\hat{L}_y = i\hbar(-\cos \phi \partial_\theta + \cot \theta \sin \phi \partial_\phi), \quad (35.11)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \partial_\phi. \quad (35.12)$$

A léptető operátorok koordinátareprezentációs alakja:

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y = \hbar e^{i\phi} (\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi), \quad (35.13)$$

$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y = \hbar e^{-i\phi} (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi). \quad (35.14)$$

Szükségünk van még az L^2 operátorra is, amelyet legegyszerűbben a 33. szakaszban látott (33.17)

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z \quad (35.15)$$

összefüggés alapján számíthatunk ki.

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ \hat{L}_- &= \hbar^2 e^{i\phi} (\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) \left[e^{-i\phi} (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) \right] = \\ &= \hbar^2 \partial_\theta (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) + \hbar^2 e^{i\phi} i \cot \theta \partial_\phi \left[e^{-i\phi} (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) \right] = \\ &= \hbar^2 (-\partial_\theta^2 - i \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi + i \cot \theta \partial_\theta \partial_\phi + \cot \theta (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) - \\ &\quad - i \cot \theta \partial_\theta \partial_\phi - \cot^2 \theta \partial_\phi^2) = \\ &= \hbar^2 (-\partial_\theta^2 - i \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi + \cot \theta (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) - \cot^2 \theta \partial_\phi^2) = \\ &= \hbar^2 (-\partial_\theta^2 - i \partial_\phi - \cot \theta \partial_\theta - \cot^2 \theta \partial_\phi^2). \end{aligned} \quad (35.16)$$

Az $\hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \partial_{\phi}^2$, továbbá $-\hbar \hat{L}_z = i\hbar^2 \partial_{\phi}$ fölhasználásával adódik L^2 gömbi koordinátás alakja:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\partial_{\theta}^2 + \cot \theta \partial_{\theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_{\phi}^2 \right) = -\hbar^2 \Delta_{\theta\phi}. \quad (35.17)$$

Ismeretes, hogy itt a $-\hbar^2$ -et szorzó differenciáloperátor éppen a Δ Laplace-operátor gömbi koordinátákban fölírt alakjának szögektől függő része, erre utal a második egyenlőségjel után az $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta\phi}$ jelölés.

A (35.17) és a (35.12) alapján könnyen látható, hogy az L^2 -nek és az L_z -nek megfelelő differenciáloperátorok fölcserélhetők, s ezt el is várjuk, hiszen ez az általános (33.6) fölcserélhetőségi eredmény speciális esete. Némileg hosszabb számolással ugyan, de belátható, hogy hasonlóan (35.17) és 35.13 illetve (35.14) is fölcserélhetők.

Az általános elméletből (33. szakasz) tudjuk, hogy fölcserélhetők lévén kereshetjük \hat{L}^2 és \hat{L}_z közös sajátfüggvényrendszerét, a korábban látott (33.32) és (33.33) sajátérték-egyenleteknek megfelelő sajátértékekkel. Az L^2 -nek megfelelő kvantumszámot itt j helyett ℓ -el szokás jelölni, ℓ neve ekkor mellékkvantumszám. Így:

$$\hat{L}^2 \psi(r, \theta, \phi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) \psi(r, \theta, \phi), \quad (35.18)$$

$$\hat{L}_z \psi(r, \theta, \phi) = m \hbar \psi(r, \theta, \phi). \quad (35.19)$$

Látni fogjuk, hogy a 33. szakaszban kapott eredmény a megengedett sajátértékekre itt csak megszorítással lesz érvényes. A pályaimpulzusmomentum esetén az ℓ mellékkvantumszám csak egész értékű lehet, félegész nem, és ugyanez áll az L_z sajátértékeit megadó mágneses kvantumszámra is, azaz itt m is csak egész lehet.

Keressük tehát a $\psi(r, \theta, \phi)$ sajátfüggvényeket. Mivel láthatólag sem \hat{L}^2 , sem \hat{L}_z nem függ r -től, a megoldás

$$\psi(r, \theta, \phi) = \mathcal{R}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \phi) \quad (35.20)$$

alakú, ahol $\mathcal{R}(r)$ a radiális koordináta tetszőleges függvénye, $Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$ pedig a

$$-(\partial_{\theta}^2 + \cot \theta \partial_{\theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_{\phi}^2) Y_{\ell}^m(\theta, \phi) = \ell(\ell+1) Y_{\ell}^m(\theta, \phi), \quad (35.21)$$

$$-i \partial_{\phi} Y_{\ell}^m(\theta, \phi) = m Y_{\ell}^m(\theta, \phi) \quad (35.22)$$

egyenletek megoldása. Foglalkozzunk előbb a másodikkal, amelyben nincs θ szerinti deriválás. Ezért abból láthatólag

$$Y_{\ell}^m(\theta, \phi) = F_{\ell}^m(\theta) e^{im\phi}. \quad (35.23)$$

Mivel a térben a ϕ és a $\phi + 2\pi$ helyek azonosak, a függvénynek ezeken a helyeken ugyanazt az értéket kell fölvennie, amiből $e^{i2\pi m} = 1$. Ebből következik, hogy most az m csak egész szám lehet, szemben az általános elméletben kapott eredménnyel, amely félegész értékeket is megengedett. Viszont tudjuk, hogy ha m egész akkor ℓ is egész kell, hogy legyen.

Válasszunk egy ℓ egész számot. Tudjuk az általános elméletből (lásd. 33. szakasz), hogy $m = m_+ = \ell$ esetén

$$\hat{L}_+ Y_{\ell}^{\ell}(\theta, \phi) = 0. \quad (35.24)$$

Ide beírva (35.13)-at és (35.23)-at $m = \ell$ -lel, és leosztva $\hbar e^{i(\ell+1)\phi}$ -vel kapjuk, hogy

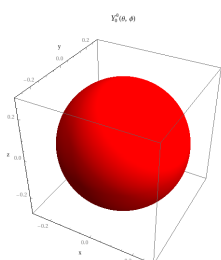
$$(\partial_{\theta} - \ell \cot \theta) F_{\ell}^{\ell}(\theta) = 0. \quad (35.25)$$

Ennek az elsőrendű közönséges differenciálegyenletnek az általános megoldása

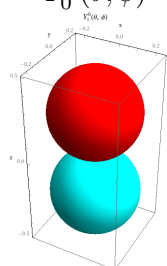
$$F_{\ell}^{\ell}(\theta) = c_{\ell} (\sin \theta)^{\ell}, \quad (35.26)$$

ahol c_{ℓ} alkalmasan választandó normálási tényező. Ebből a konstans erejéig egyértelmű

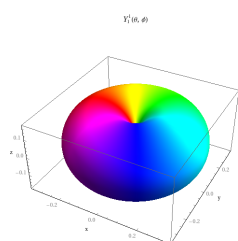
$$Y_{\ell}^{\ell}(\theta, \phi) = c_{\ell} (\sin \theta)^{\ell} e^{i\ell\phi} \quad (35.27)$$



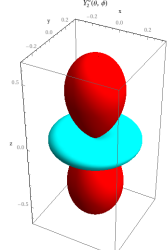
$$Y_0^0(\theta, \phi)$$



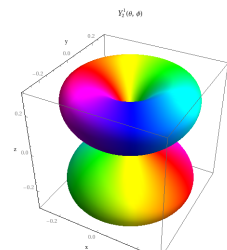
$$Y_1^0(\theta, \phi)$$



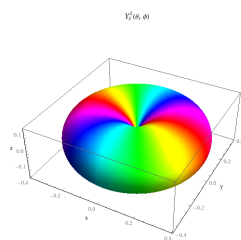
$$Y_1^1(\theta, \phi)$$



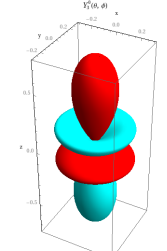
$$Y_2^0(\theta, \phi)$$



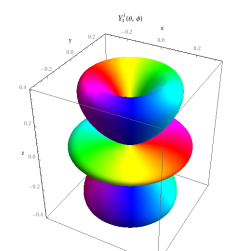
$$Y_2^1(\theta, \phi)$$



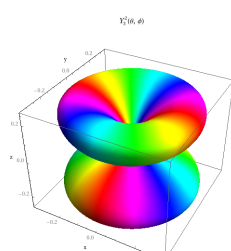
$$Y_2^2(\theta, \phi)$$



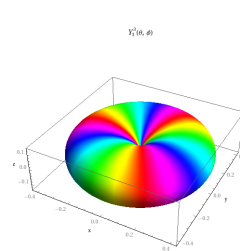
$$Y_3^0(\theta, \phi)$$



$$Y_3^1(\theta, \phi)$$



$$Y_3^2(\theta, \phi)$$



$$Y_3^3(\theta, \phi)$$

15. ábra. Az első néhány gömbfüggvény

megoldást kapjuk. Innen pedig a további, $m < \ell$: $Y_{\ell}^{\ell-1}(\theta, \phi), \dots, Y_{\ell}^m(\theta, \phi), \dots, Y_{\ell}^{-\ell}(\theta, \phi)$ megoldások az általános elmélet alapján az \hat{L}_- operátor ismételt alkalmazásával kaphatók meg. Az $Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$ függvényeket *gömbfüggvényeknek*, vagy *gömbi harmonikusoknak* szokás nevezni. Megjegyezzük, hogy ezeket a (35.21, 35.22) egyenleteknek az egységgömb felületén négyzetesen integrálható megoldásaként is meg lehet kapni. A gömbfüggvények egy konstans erejéig egyértelműen meghatározottak. Az állandó abszolút értékét a normálás határozza meg. (A gömbfüggvények használatakor figyeljünk arra, hogy a néha képzetesnek is választott normálási tényezőt illetően annak, mint komplex számnak az argumentumára többféle konvenció is használatos.) A függvények a normálás után egy ortonormált rendszert alkotnak, azaz az egységgömb felületére integrálva:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} (Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \phi))^* Y_{\ell}^m(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}. \quad (35.28)$$

A gömbfüggvények rendszere teljes is, azaz tetszőleges, az egységgömbön értelmezett négyzetesen integrálható $g(\theta, \phi)$ függvény kifejezhető ezek általában végtelen összegeként:

$$g(\theta, \phi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} c_{\ell m} Y_{\ell}^m(\theta, \phi). \quad (35.29)$$

A fenti (35.28) és (35.29) formulák a komplex Fourier-sor általánosításai. A periodikus, azaz az egységkörön értelmezett függvények helyett itt azonban az egységgömbön értelmezett függvényekről van szó.

Egy további tulajdonságot még jegyezzünk meg: Az $m = 0$ indexű $Y_{\ell}^0(\theta)$ függvények, amelyek nem függenek ϕ -től lényegében a $\cos \theta$ -tól függő Legendre-polinomok

$$Y_{\ell}^0(\theta) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_{\ell}(\cos \theta), \quad (35.30)$$

ahol a $P_{\ell}(z)$ a $[-1, 1]$ intervallumon teljes ortogonális polinomrendszer $P_{\ell}(1) = 1$ választással. Az $\ell = 0, 1, 2, 3, 4$ indexű gömbfüggvényeket rendre s, p, d, f, g függvényeknek szokás nevezni a spektrószkópiából kölcsönzött elnevezések miatt.

Az első néhány gömbfüggvény az egyik szokásos fáziskonvenció szerint, ahol a normálási tényezők valóságosak, a következő:


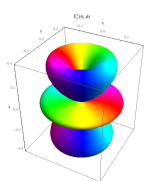

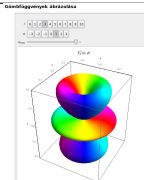
$$Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad (35.31)$$

$$Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_1^1(\theta, \phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi} \quad Y_1^{-1}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi}. \quad (35.32)$$

Az $Y_0^0(\theta, \phi)$ a konstans, tehát gömbszimmetrikus s függvény, a (35.32) sorban megadott függvények pedig a p függvények.

A gömbfüggvények további tulajdonságai, a fáziskonvenciók és más általános formulák kvantummechanika illetve matematikai fizika könyvekben találhatók meg. Lásd továbbá

http://en.wikipedia.org/wiki/Spherical_harmonics

GÖMBFÜGGVÉNYEK		
		Az animáción az $Y_3^1(\theta, \phi)$ gömbfüggvénnyel jellemzett stacionárius – azaz $e^{-iEt/\hbar}$ időüggést is tartalmazó – állapot időfüggését láthatjuk. Az ábra úgy készült, hogy a függvény abszolút értékét felmérjük a szögek által meghatározott irányba, az így kialakított felületet pedig a komplex függvényérték fázisszögének színskódjával színezzük.
		Az ábrák a gömbfüggvények háromdimenziós polárdiagramját mutatják. Az ábrázolni kívánt állapotot az ℓ és m kvantumszámok beállításával választhatjuk ki.

36. A térbeli paritás

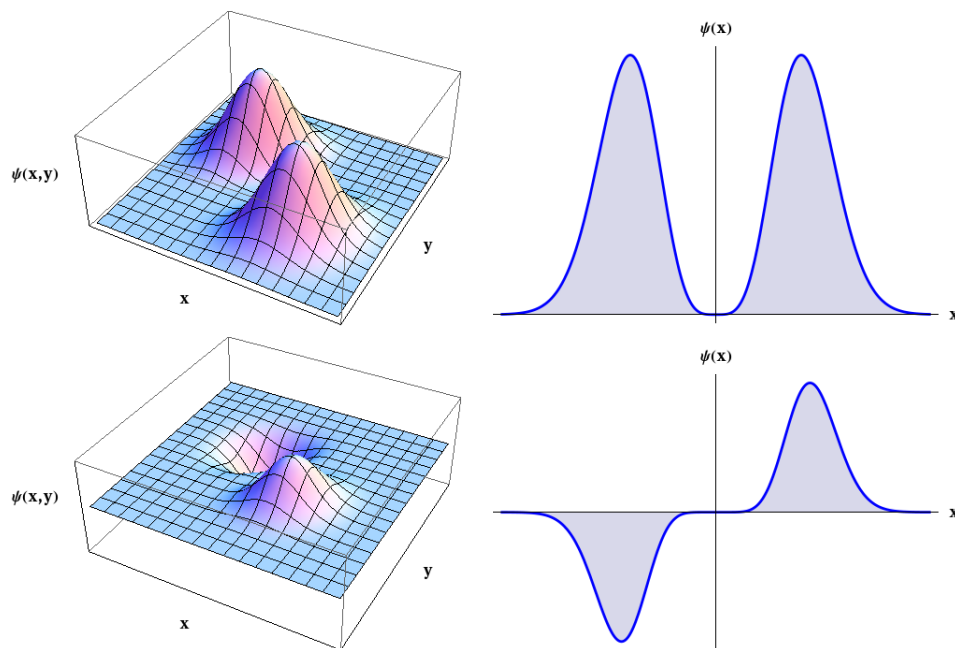
36.1. A paritás definíciója

A paritás vagy párosság operátora olyan \mathcal{H} térben van értelmezve, amelynek elemei egy részecske állapotát adják meg a háromdimenziós koordinátatérben. Defináljuk a paritás-operátort a $\psi(\mathbf{r})$ hullámfüggvények terén a következőképpen:

$$\Pi\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}). \quad (36.1)$$

Belátható, hogy Π önadjungált és unitér is egyben, tehát az inverze saját maga, ami amúgy is egyszerűen látszik a fenti definícióból.

36.1 Feladat: Bizonyítsuk, hogy Π önadjungált és unitér operátor.



16. ábra. Példa páros és páratlan függvényre

Π sajátértékei nyilvánvalóan a ± 1 számok. A Π megfelelő sajátfüggvényei az origóra való tükrözésre nézve a páros illetve a páratlan függvények. A Π nyilván hasonlóan értelmezhető az x

tengelyen értelmezett egydimenziós hullámfüggvények terén is. Tekintsük az $\Pi \mathbf{R}$ operátort a $\psi(\mathbf{r})$ hullámfüggvények terén. Egyrészt $\Pi \mathbf{R} \psi(\mathbf{r}) = \Pi \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) = -\mathbf{r} \psi(-\mathbf{r}) = -\mathbf{r} \Pi \psi(\mathbf{r}) = -\mathbf{R} \Pi \psi(\mathbf{r})$, azaz $\Pi \mathbf{R} = -\mathbf{R} \Pi$. Tehát

$$\Pi \mathbf{R} = -\mathbf{R} \Pi, \quad \text{vagy} \quad \mathbf{R} \Pi + \Pi \mathbf{R} = 0. \quad (36.2)$$

Illetve

$$\Pi \mathbf{R} \Pi = -\mathbf{R}. \quad (36.3)$$

Az ilyen tulajdonságú operátort páratlannak nevezünk. \mathbf{R} mellett a \mathbf{P} impulzusoperátor is páratlan, ami tulajdonképpen azt jelenti, hogy koordináta-rendszer-középpontjára való tükrözésekor az impulzus – csakúgy mint a koordináta – előjelet vált.

36.2 Feladat: Bizonyítsuk, hogy az impulzus \mathbf{P} operátora páratlan.

Azokat az itt általában \mathbf{K} -val jelölt operátorokat viszont, amelyek fölcserélhetők Π -vel, azaz (36.2)-vel szemben a

$$\Pi \mathbf{K} = \mathbf{K} \Pi, \quad \text{vagy} \quad \mathbf{K} \Pi - \Pi \mathbf{K} = 0 \quad (36.4)$$

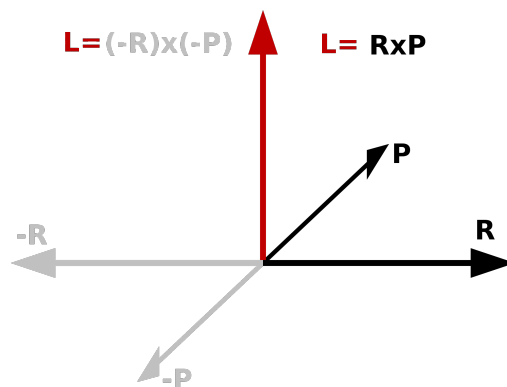
összefüggésnek tesznek eleget, a tértükrözésre nézve páros operátornak nevezzük. Páros operátor nyilvánvalóan egy páratlan operátor négyzete. Tehát páros például a kinetikus energia operátora, mert \mathbf{P}^2 -el arányos, de páros egy centrális erőter esetén a teljes Hamilton-operátor mert az $|\mathbf{R}|$ operátor, amitől centrális erőterben a potenciális energia függ szintén páros. Ekkor, mint tudjuk a H -nak és Π -nek van közös sajátvektorrendszere, azaz H sajátvektorai között vannak párosak és páratlanok. Megjegyezzük, hogy H -nak ettől függetlenül lehetnek olyan sajátvektorai is, amelyek sem nem párosak sem nem páratlanok!

36.2. Kapcsolat a pályaimpulzusmomentummal

Először is tekintsük a pályaimpulzusmomentum

$$\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P} \quad (36.5)$$

operátorát. Ez a föntiek szerint páros $\Pi \mathbf{L} = \mathbf{L} \Pi$, mert tükrözéskor mind \mathbf{R} , mind \mathbf{P} előjelet vált. Ezért is nevezzük \mathbf{L} -et *pszeudovektornak*, vagy *axiális* vektornak, mert a "közönséges", másnéven *poláris* vektorok előjelet váltanak tükrözéskor. \mathbf{L} viszont tükrözéskor nem vált előjelet, \mathbf{L} csak a forgatásokkal szemben viselkedik vektorként (lásd 17. ábra). \mathbf{L} mindhárom komponense páros.

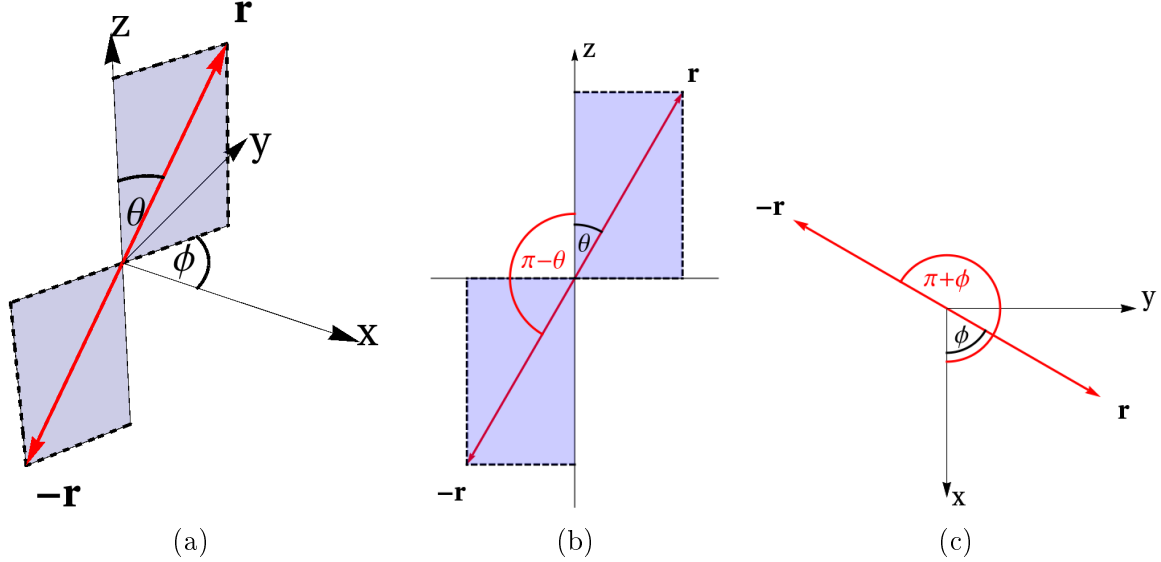


17. ábra. Az \mathbf{L} pszeudovektorként viselkedik

Tekintsük most a pályaimpulzusmomentum sajátfüggvényeit, amelyek alakja

$$\mathcal{R}(r) Y_\ell^m(\theta, \phi), \quad (36.6)$$

ahol $\mathcal{R}(r)$ tetszőleges, csak $r = |\mathbf{r}|$ -től függő függvény $Y_\ell^m(\theta, \phi)$ pedig egy gömbfüggvény. Világos, hogy $\Pi\mathcal{R}(r) = \mathcal{R}(r)$, mert a helyvektor hossza $r = |\mathbf{r}|$ nem változik tükrözéskor, tehát a fenti függvény $\mathcal{R}(r)$ radiális része páros. Most megmutatjuk, hogy a szögektől függő rész is határozott paritású, azaz a Π -nek sajátfüggvénye. Tükrözzük ehhez az \mathbf{r} vektort az origóra, és nézzük meg mi történik a polár- illetve az azimutuszöggel. Belátható geometriai okoskodással (lásd a 36.2 ábrán),



18. ábra. A polár- illetve az azimutuszög változása az \mathbf{r} vektor origóra való tükrözésekor. A változás a (b) ábrán az \mathbf{r} - z síkra merőleges irányból nézve, a (c)-n pedig a z tengely irányából nézve látható.

vagy a (35.3) kifejezésében végrehajtott helyettesítéssel algebrai úton, hogy az $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ transzformációnak a

$$\theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \phi \rightarrow \phi + \pi \quad (36.7)$$

transzformáció felel meg. Tekintsük most egy adott ℓ esetén a legnagyobb m -hez, azaz az $m = \ell$ -hez tartozó $Y_\ell^\ell(\theta, \phi) = \sin^\ell \theta e^{i\ell\phi}$ gömbfüggvényt (a normálási tényező itt nem játszik szerepet) és hajtsuk végre a fenti helyettesítéseket a szögekben:

$$\Pi \sin^\ell \theta e^{i\ell\phi} = \sin^\ell(\pi - \theta) e^{i\ell(\phi + \pi)} = (-1)^\ell \sin^\ell \theta e^{i\ell\phi}. \quad (36.8)$$

Azaz a függvény páros vagy páratlan attól függően, hogy ℓ páros vagy páratlan. Tekintsük most a ΠL_- operátort, ahol L_- a lefelé léptető operátor. Mivel L_- az \mathbf{L} vektor komponenseinek összege ($L_- = L_x - iL_y$) ezért maga is páros:

$$\Pi L_- = L_- \Pi, \quad (36.9)$$

amiről közvetlenül is meggyőződhetünk, ha a (35.14)-en végrehajtjuk a (36.7) transzformációt. Ez igaz L_- minden k -adik hatványára is, s így $L_-^k Y_\ell^\ell(\theta, \phi) = Y_\ell^{\ell-k}(\theta, \phi)$ is $(-1)^\ell$ paritású. Kicsit részletesebben, legyen $Y_\ell^m(\theta, \phi) = c_{lm} L_-^{\ell-m} Y_\ell^\ell(\theta, \phi)$, ahol a c_{lm} számok az L_- operátor $(\ell - m)$ -szeres alkalmazása során föllépő, a (33.38) összefüggésből meghatározható, a normálást biztosító számok szorzatai. Eszerint

$$\begin{aligned} \Pi Y_\ell^m(\theta, \phi) &= c_{lm} \Pi L_-^{\ell-m} Y_\ell^\ell(\theta, \phi) = c_{lm} L_-^{\ell-m} \Pi Y_\ell^\ell(\theta, \phi) = \\ &= (-1)^\ell c_{lm} L_-^{\ell-m} Y_\ell^\ell(\theta, \phi) = (-1)^\ell Y_\ell^m(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (36.10)$$

Tehát m -től függetlenül

$$\Pi Y_\ell^m(\theta, \phi) = (-1)^\ell Y_\ell^m(\theta, \phi), \quad (36.11)$$

azaz a paritást az ℓ mellékkvantumszám paritása határozza meg.

36.3 Feladat: Számítsuk ki \mathbf{L} és \mathbf{R} komponenseinek kommutátorát.

36.4 Feladat: Számítsuk ki \mathbf{L} és \mathbf{P} komponenseinek kommutátorát.

36.5 Feladat: A fenti két feladat alapján indokoljuk meg, hogy \mathbf{R} és \mathbf{P} miért vektoroperátorok. Adjunk példát skalár operátorra.

37. Centrális erőter sajátértékproblémája, a radiális egyenlet

Centrális erőterben a Hamilton-operátor:

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(|\mathbf{R}|). \quad (37.1)$$

Itt a továbbiakban az $|\mathbf{R}| = R$, $|\mathbf{P}| = P$ jelölést használjuk.

Ennek megfelelően itt a

$$\left[\frac{P^2}{2m} + V(R) \right] |\psi\rangle = \varepsilon |\psi\rangle \quad (37.2)$$

sajátértékprobléma megoldását keressük. Megmutatható, hogy L^2 és L_z is fölcserélhető ezzel a H -val, mert H csak skalároktól függ.

37.1 Feladat: Mutassuk meg, hogy L^2 és L_z is fölcserélhető a fenti (37.1) Hamilton-operátorral.

A fölcserélhetőség miatt kereshetjük majd H , L^2 és L_z közös sajátvektorait.

Most kifejezzük L^2 -el \mathbf{P}^2 -et.

A klasszikus mechanikában az $\mathcal{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ miatt láthatóan $\mathcal{L}^2 = r^2 p^2 \sin^2 \alpha = r^2 p^2 (1 - \cos^2 \alpha) = r^2 p^2 - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2$, ahol α az \mathbf{r} és \mathbf{p} által bezárt, általában időben változó szög, $(\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})$ pedig a két háromdimenziós vektor közösleges skaláris szorzatát jelzi. Eszerint klasszikusan

$$p^2 = (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2 / r^2 + \mathcal{L}^2 / r^2 = p_r^2 + \mathcal{L}^2 / r^2. \quad (37.3)$$

A kvantummechanikában viszont, mivel \mathbf{R} és \mathbf{P} komponensei nem cserélhetők föl, egy \hbar nagyságrendű korrekciós tag is föllép, a megfelelő operátorok között az

$$\mathbf{L}^2 = (\mathbf{R} \times \mathbf{P})^2 = \mathbf{R}^2 \mathbf{P}^2 - (\mathbf{R} \cdot \mathbf{P})^2 + i\hbar \mathbf{R} \cdot \mathbf{P} \quad (37.4)$$

összefüggés adódik. Ennek belátásához vegyük figyelembe, hogy $\mathbf{L}^2 = L_i L_i = (\epsilon_{ijk} X_j P_k)(\epsilon_{iln} X_l P_n)$, ahol a kétszer előforduló indexekre összegezni kell. Kihasználva továbbá az $\epsilon_{ijk}\epsilon_{iln} = \delta_{jl}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{kl}$ összefüggést, kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} L_i L_i &= X_j P_k X_j P_k - X_j P_k X_k P_j = X_j (X_j P_k - i\hbar \delta_{jk}) P_k - \\ &\quad - X_j (X_k P_k - 3i\hbar) P_j = \\ &= X_j X_j P_k P_k - i\hbar \delta_{jk} X_j P_k - X_j X_k P_j P_k + 3i\hbar X_j P_j = \\ &= X_j X_j P_k P_k + 2i\hbar X_j P_j - X_j (P_j X_k + i\hbar \delta_{jk}) P_k = \\ &= X_j X_j P_k P_k - X_j P_j X_k P_k + i\hbar X_j P_j. \end{aligned}$$

S ez éppen a (37.4) egyenlőség koordinátákkal fölírva. (37.4)-ből

$$\mathbf{P}^2 = \frac{1}{\mathbf{R}^2} [(\mathbf{R} \cdot \mathbf{P})^2 - i\hbar \mathbf{R} \cdot \mathbf{P}] + \frac{1}{\mathbf{R}^2} \mathbf{L}^2. \quad (37.5)$$

Áttérünk koordinátareprezentációba $\mathbf{R} \rightarrow \mathbf{r}$, $\mathbf{P} \rightarrow -i\hbar\nabla$ és gömbi koordinátákra: $\mathbf{r} = \mathbf{e}_r r$, $\mathbf{P} = -i\hbar\nabla = -i\hbar(\hat{\mathbf{e}}_r \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\mathbf{e}}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\mathbf{e}}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi})$. Ebből $\mathbf{R} \cdot \mathbf{P} = -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r}$. A \mathbf{P}^2 koordinátareprezentációjában gömbi koordinátákban így

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^2 &= \frac{1}{r^2} \left[\left(-i\hbar r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 - \hbar^2 r \frac{\partial}{\partial r} \right] - \hbar^2 \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\phi} = \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\phi} \right) = -\hbar^2 \Delta_{r\theta\phi} = -\hbar^2 \Delta \end{aligned} \quad (37.6)$$

alakú. Mindez természetes megvilágításba helyezi azt a korábbi (35.17) eredményünket is, hogy az impulzusnyomaték négyzetének operátora koordinátareprezentációban és gömbi koordinátákban (a $-\hbar^2$ faktortól eltekintve) éppen a Laplace-operátor szögektől függő részével egyezik meg. Ugyanis egyrészt $\mathbf{P} \rightarrow -i\hbar\nabla$ miatt $\mathbf{P}^2 = -\hbar^2 \Delta$, másrészt (37.5) szerint a \mathbf{P}^2 radiális része a szögletes zárójelben található operátor, az $\frac{1}{\mathbf{R}^2} \mathbf{L}^2$ -ben tehát a Laplace szögektől függő részének kell szerepelnie, s ugyanez látható a (37.6) koordinátareprezentációban kiírt alakból is.

37.2 Feladat: Bizonyítsuk be, hogy $-\hbar^2(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}) = (-i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r)^2 = [\frac{1}{2}(\frac{\mathbf{R}}{R} \mathbf{P} + \mathbf{P} \frac{\mathbf{R}}{R})]^2 = P_r^2$.

37.3 Feladat: A P_r operátor önadjungált, amit bizonyítsunk koordinátareprezentációban is.

A (37.2) egyenlet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) + V(r) \psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi(\mathbf{r}) \quad (37.7)$$

koordinátareprezentációs alakját gömbi koordinátákban fogjuk megoldani. Szeparáljuk a radiális és a szögektől függő részt a

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \hbar^2 \frac{1}{2m r^2} \Delta_{\theta\phi} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = \varepsilon \psi(r, \theta, \varphi) \quad (37.8)$$

sajátérték-egyenletben a

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \mathcal{R}(r) Y_\ell^m(\theta, \phi) = \frac{u(r)}{r} Y_\ell^m(\theta, \phi) \quad (37.9)$$

föltevéssel. Az $\mathcal{R}(r)$ függvényre kapható

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \mathcal{R}(r) + \hbar^2 \frac{1}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \mathcal{R}(r) + V(r) \mathcal{R}(r) = \varepsilon \mathcal{R}(r) \right] \quad (37.10)$$

egyenletet *radiális egyenletnek* nevezzük, ebből nyerjük az $u(r) = r\mathcal{R}(r)$ -re vonatkozó

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u(r) + V(r) u(r) = \varepsilon u(r) \quad (37.11)$$

közönséges differenciálegyenletet, amelyet szintén szokás radiális egyenletnek nevezni.

37.4 Feladat: Mutassuk meg, hogy $u(r)$ -re valóban a fenti (37.11) differenciálegyenlet adódik.

Ennek alakja az $u(r)$ függvényre olyan, mint egy egydimenziós problémára vonatkozó energiasajátérték-egyenlet, csak a valódi potenciál helyett a $V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$ effektív potenciál szerepel benne. A $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$ neve *centrifugális potenciál*, ez analóg a klasszikus mechanikában is megjelenő $\mathcal{L}^2/2mr^2$ potenciállal.

38. A radiális egyenlet megoldásainak aszimptotikus viselkedése

38.1. Aszimptotikus viselkedés $r \rightarrow \infty$ esetén

Ha $V(\infty) \rightarrow 0$, akkor $r \rightarrow \infty$ esetén a potenciális energia tagot és a centrifugális energiát elhagyhatjuk, s így a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} = \varepsilon u \quad (38.1)$$

egyenletet kapjuk. Ezt

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon u = 0 \quad (38.2)$$

alakba írva, fölismerjük, hogy ez egy ismert differenciálegyenlet, amelynek megoldásai $\sin kr$ és $\cos kr$, ha $\frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon = k^2$ értéke pozitív. Mivel ezek a függvények nem négyzetesen integrálhatóak, ezért ezek az $\varepsilon > 0$ energiához tartozó megoldások az úgynevezett *szórási állapotok* (lásd ?? fejelet) leírására alkalmasak. Ugyanez a helyzet, ha $\varepsilon = 0$, mert a megoldás ekkor lineáris függvény, amely szintén nem négyzetesen integrálható.

Kötött állapotnak nevezett, négyzetesen integrálható megoldásokat csak akkor kapunk, ha $\varepsilon < 0$. Ekkor a

$$0 < -\frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon =: \kappa^2 \quad (38.3)$$

jelölést szokás alkalmazni. A fönti (38.2) egyenlet két alkalmas lineárisan független megoldása ekkor $e^{\kappa r}$ és $e^{-\kappa r}$, amelyek közül a $\kappa > 0$ miatt csak az utóbbi négyzetesen integrálható. A hullámfüggvény aszimptotikus viselkedése a ∞ -ben, kötött állapotok esetén tehát

$$u(r \rightarrow \infty) \sim e^{-\kappa r}. \quad (38.4)$$

38.2. Aszimptotikus viselkedés a 0 környezetében

Tegyük föl, hogy a $V(r)$ potenciális energia az $r = 0$ közelében véges marad, vagy ha ∞ -hez is tart, az nem gyorsabb, mint ahogyan $1/r^2$ tart a ∞ -be a 0 körül. Ez utóbbi osztályba tartozik a Coulomb-típusú potenciál, amely az origóban $1/r$ rendben divergál, de lassabban mint $1/r^2$. Ekkor a (37.11) radiális egyenletben a 0 körül a potenciális energiát elhagyhatjuk a centrifugális energia tag mellett, és ugyancsak elhagyhatjuk az εu tagot is. Így a

$$\frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u = 0 \quad (38.5)$$

másodrendű lineáris egyenletet kapjuk, amelynek két megoldása $r^{\ell+1}$ és $1/r^\ell$.

38.1 Feladat: Keressük a (38.5) egyenlet megoldását r^ℓ alakban.

38.2 Feladat: Bizonyítsuk be, hogy $1/r^\ell$, ha $\ell \neq 0$, akkor nem négyzetesen integrálható a $(0, \infty)$ intervallumon.

Az $1/r^\ell$ alakú megoldás azonban a 0 körüli viselkedése miatt nem lesz négyzetesen integrálható, kivéve az $\ell = 0$ esetet.

De ez utóbbi sem engedhető meg, mert ekkor a 0 közelében $\mathcal{R}(r) = \frac{u(r)}{r} \sim \frac{1}{r}$ lenne amelyre alkalmazva a kinetikus energiában szereplő Δ -t az eredmény a $\delta(\mathbf{r})$ Dirac-deltával lenne arányos úi. $\Delta \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r})$ (amint az pl. az elektrosztatikából ismert, hiszen ez egy pontszerű töltés $\delta(\mathbf{r})$ sűrűségéhez tartozó ismert $\frac{1}{4\pi r}$ potenciált adja a Poisson-egyenletnek megfelelően). A kinetikus energiából ily módon adódó $\delta(\mathbf{r})$ -nek megfelelő szingularitást csak a potenciális energia kompenzálhatná a sajátérték-egyenletben, abban az esetben, ha az is hasonlóan szinguláris lenne, azaz a $V(r) \sim \delta(\mathbf{r})$ esetben. De kikötöttük, hogy a potenciális energia $1/r^2$ -nél kevésbé szinguláris a 0

körül, tehát ilyen esetben az $\mathcal{R}(r) = 1/r$ sem jöhet szóba. Azaz az u függvényre a 0 körül a föntebb előírt viselkedésű potenciál esetén csak a nemszinguláris $r^{\ell+1}$ -el arányos viselkedés lehet jó. Tehát

$$u(r \rightarrow 0) \sim r^{\ell+1}, \quad (38.6)$$

amiből az is látszik, hogy nulla körül a hullámfüggvény radiális része

$$\mathcal{R}(r) = u(r)/r \sim r^{\ell}, \quad (38.7)$$

azaz nullához tart, ha $\ell \neq 0$, és véges ha $\ell = 0$.

Még fölírjuk a teljes radiális egyenletet kötött állapotok keresése esetén a fönt bevezetett κ -val:

$$\frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) u = -\frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon u = \kappa^2 u. \quad (38.8)$$

Itt célszerű bevezetni a $\kappa r = \varrho$ dimenziótlán változót, amellyel az u -ra vonatkozó egyenlet azon alakja, amelyet kötött állapotok, tehát $\varepsilon < 0$ esetén használunk:

$$\left(\frac{d^2}{d\varrho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\varrho^2} - \frac{V(\varrho/\kappa)}{|\varepsilon|} - 1 \right) u(\varrho) = 0, \quad (38.9)$$

ahol a föntiek szerint $u(\varrho \rightarrow 0) \sim \varrho^{\ell+1}$ és $u(\varrho \rightarrow \infty) \sim e^{-\varrho}$.

Ezt a radiális egyenletet gyakran használják az atomfizikában, azonban a megoldása zárt, analitikus alakban csak néhány speciális alakú $V(r)$ potenciális energia esetén lehetséges. Megoldására ezért általában numerikus módszereket alkalmaznak. Viszont az egyik legalapvetőbb potenciális energia, a Coulomb-féle $1/r$ -el arányos potenciál esetén a megoldásokat analitikusan, elemi függvények segítségével is meg lehet határozni. Ezzel a nagyon fontos esettel foglalkozunk a következő szakaszban.

39. Vonzó Coulomb-potenciál sajátértékproblémája, kötött állapotok

Vonzó Coulomb-erő esetén a potenciális energia:

$$V(r) = -\frac{\gamma}{r}, \quad (39.1)$$

ahol $\gamma > 0$. Ilyen a potenciális energiája a hidrogénatomban (H-atom) a proton terében mozgó elektronnak, ahol $\gamma = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} q_0^2 =: e_0^2$, ahol q_0 az elemi töltést jelenti. Az úgynevezett hidrogénszerű ionok esetén, amelyek magjában Z számú proton tart kötve egyetlen elektront: $\gamma = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} Z q^2$. A hidrogénszerű ionokra példa az egyszer ionizált hélium: He^+ ($Z = 2$), a kétszer ionizált Li^{++} ($Z = 3$), stb. A megoldandó sajátérték-egyenlet ebben az esetben

$$\left(\frac{P^2}{2m} - \frac{\gamma}{R} \right) |\psi\rangle = \varepsilon |\psi\rangle. \quad (39.2)$$

A kötött állapotokra, tehát az előző szakasz eredménye szerint a negatív ε -okra szorítkozunk. Átérve koordinátareprezentációra és gömbi koordinátákra, az előző szakasz szerint, a ψ energiasajátfüggvényt a

$$\psi(r, \theta, \phi) = \mathcal{R}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \phi) = \frac{u(r)}{r} Y_{\ell}^m(\theta, \phi) \quad (39.3)$$

alakban kereshetjük, ahol a

$$\sqrt{-\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} r = \kappa r = \varrho \quad (39.4)$$

jelöléssel most az $u(\varrho)$ -ra vonatkozó

$$\left(\frac{d^2}{d\varrho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\varrho^2} + \frac{2m\gamma}{\hbar^2\kappa} \frac{1}{\varrho} - 1 \right) u(\varrho) = 0 \quad (39.5)$$

egyenletet kell megoldanunk. Vezessük be a

$$\varrho_0 = \frac{2m\gamma}{\hbar^2\kappa} \quad (39.6)$$

újabb dimenziótlan változót, ekkor az egyenlet

$$\left(\frac{d^2}{d\varrho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\varrho^2} + \frac{\varrho_0}{\varrho} - 1 \right) u(\varrho) = 0 \quad (39.7)$$

alakú. A megoldást az előző szakaszban vizsgált aszimptotikus viselkedés alapján az

$$u(\varrho) = \varrho^{\ell+1} w(\varrho) e^{-\varrho} \quad (39.8)$$

alakban keressük, ahol a $\varrho^{\ell+1}$ tényező biztosítja a helyes aszimptotikus alakot a 0 körül, az $e^{-\varrho}$ faktor a ∞ körül, a $w(\varrho)$ keresendő függvény pedig azt, hogy az $u(\varrho)$ fönti alakja az egyenlet pontos megoldása legyen. Behelyettesítve u ezen (39.8) alakját a (39.7) egyenletbe, w -re a következő differenciálegyenletet kapjuk:

$$\varrho \frac{d^2 w}{d\varrho^2} + 2(\ell+1-\varrho) \frac{dw}{d\varrho} + (\varrho_0 - 2(\ell+1))w = 0. \quad (39.9)$$

A $w(\varrho)$ -nak ezen kívül még olyannak is kell lennie, hogy ne rontsa el az (39.8) formulával már előírt aszimptotikus alakokat, azaz $w(\varrho)$ -nak a 0 körül hatványsorba fejthetőnek kell lennie (egyébként a 0 körüli viselkedést elrontaná), másrészt a végtelenben csak lassabban nőhet mint e^ϱ . Keressük tehát $w(\varrho)$ -t a

$$w(\varrho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \varrho^k \quad (39.10)$$

alakú hatványsor formájában. Beírva ezt a (39.9) egyenletbe, abból a föltételből, hogy w megoldás minden ϱ -ra, a sor együtthatóira egy rekurziós formula adódik:

$$a_{k+1} = \frac{2(k+\ell+1) - \varrho_0}{(k+1)(k+2\ell+2)} a_k. \quad (39.11)$$

Most megmutatjuk, hogy amennyiben a (39.10) összeg, azaz a sor, végtelen lenne, a rekurziós formulából az következne, hogy az $u(\varrho)$ aszimptotikus alakja elromlana, abban az értelemben, hogy $u(\varrho \rightarrow \infty) \sim e^{-\varrho}$ helyett $u(\varrho \rightarrow \infty) \sim e^\varrho$ állna fönn, azaz a függvényünk nem lenne négyzetesen integrálható. Valóban, nagy k -ra ($k \gg \ell, \varrho_0$) a fönti sor együtthatói között közelítőleg az $a_{k+1} = \frac{2}{k} a_k$ rekurziós formula áll fönn, ez utóbbi pedig az $e^{2\varrho}$ végtelen sorának tulajdonsága. Ha tehát a (39.11) rekurziós összefüggéssel adott sor végtelen lenne, akkor az nagy k -k s így nagy ϱ -k esetén elrontaná az előírt $e^{-\varrho}$ jellegű aszimptotikus viselkedést. Emiatt a (39.10) sornak végesnek kell maradnia, azaz létezik egy olyan n_r , amelynél $a_{n_r} \neq 0$, de $a_{n_r+1} = 0$, s ekkor (39.11)-ből következően az összes n_r -nél nagyobb indexű a_k is eltűnik, vagyis a sor egy n_r -ed fokú polinommal redukálódik. Ez úgy és csak úgy lehetséges, ha (39.11) jobb oldalán a tört számlálója eltűnik, azaz

$$\varrho_0 = 2(n_r + \ell + 1). \quad (39.12)$$

A w polinom foksámát megadó n_r szám neve *radiális kvantumszám*. Most vezessük be az

$$n := n_r + \ell + 1 \quad (39.13)$$

definícióval a *főkvantumszámot*, amely szükségképpen pozitív egész szám. Az elnevezés oka, hogy ez a szám határozza meg az energiasajátértékeit. A (39.6) definíció alapján ugyanis

$$\varrho_0 = \frac{2m\gamma}{\hbar^2\kappa} = 2n,$$

amiből $\kappa = \frac{m\gamma}{\hbar^2} \frac{1}{n}$. Eszerint $\varepsilon = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{\gamma^2 m}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$, s így a $\gamma = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} Zq^2 =: Ze_0^2$ definícióval, a Coulomb-potenciálnak megfelelő energiasajátértékek a következők:

$$\varepsilon_n = -\frac{mZ^2e_0^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

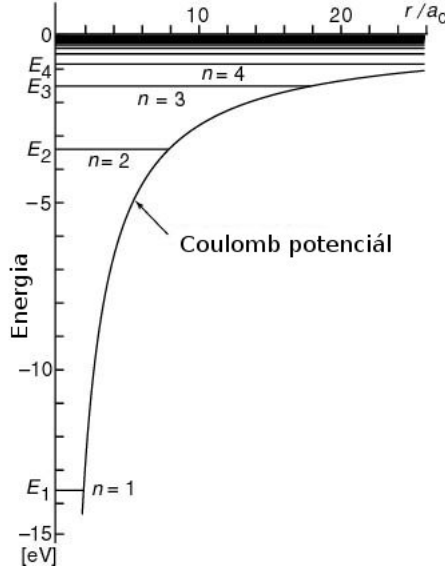
Ezek a vonzó Coulomb-potenciálhoz tartozó energiasajátértékek tehát diszkrét (ez a kötött állapotokra jellemző) és igen jó közelítéssel visszaadják a H-atom spektrumának ($Z = 1$) kísérletileg talált elsődleges szerkezetét, a Lyman-, Balmer-, stb sorozatokat. Az eredmény megegyezik a Bohr-modellből kapható formulával, ám a Bohr-modell csak erre az esetre, azaz a Coulomb-potenciálra jó, a kvantummechanikai eljárás viszont általánosan mindenfajta potenciál esetén helyes eredményt ad. Megjegyezzük, hogy az energiasajátértékek fönti diszkrét spektrumát a határföltételek teljesítésének követelménye alapján kaptuk meg.

40. A hidrogénatom elsődleges spektruma

Az előző szakaszban kapott eredmény a $Z = 1$ esetben megadja a H-atom spektrumának elsődleges szerkezetét. A különféle finomításokról alább esik szó. Az $\frac{me_0^4}{2\hbar^2}$ energiaértéket – amely $2,2 \times 10^{-18} \text{ J}$, illetve $13,6 \text{ eV}$ – nevezik 1 *Rydberg*-nek. A H-atom kötött stacionárius állapotainak energiái tehát

$$\varepsilon_n = -\frac{1}{n^2} Ry \quad (40.1)$$

értékűek, ahol n a főkvantumszám. Az előző szakasz eredményéből következően $n = n_r + \ell + 1$, ahol n_r egy polinom fokszáma, tehát egy nemnegatív egész, másrészt tudjuk, hogy, ℓ a mellékkvantumszám is nemnegatív egész $\ell = 0, 1, 2, \dots$. Ebből következik, hogy n lehetséges értékei a pozitív egész számok. A legmélyebb energiájú állapot, vagy másnéven alapállapot energiája -1 Ry , ahhoz az állapothoz képest amikor az elektront a magtól a végtelenbe a 0 potenciálú helyre távolítjuk, úgy, hogy ott a kinetikus energiája is még nulla marad. Minimálisan tehát 1 Ry energia kell ahhoz, hogy az elektront elszakítsuk a protontól, azaz 1 Ry a H-atom ionizációs energiája. n növelésével a gerjesztett állapotok energiáit kapjuk, amelyek gyorsan közelednek a 0 energiához, azaz az ionizált állapot felé.



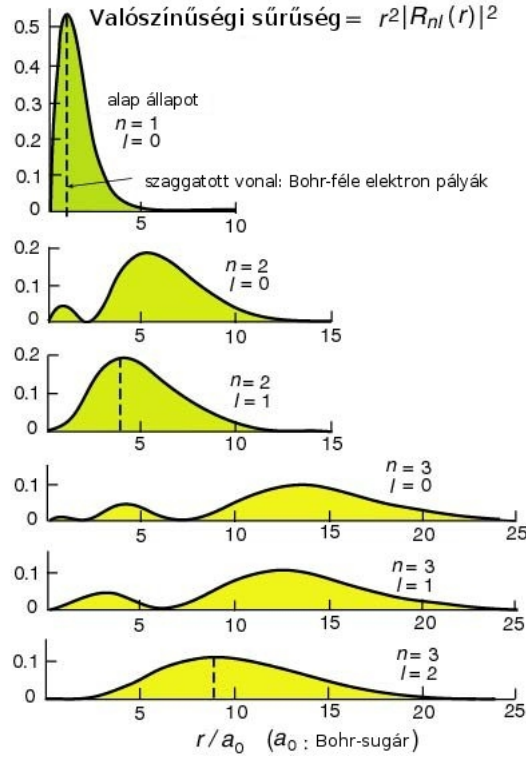
19. ábra. A H-atom stacionárius állapotainak energiái

Megjegyezzük, hogy a spektrumnak van folytonos része is, ugyanis minden $\varepsilon > 0$ pozitív sajátértékhez is tartoznak sajátállapotai a probléma (39.2)-ben megadott H Hamilton-operátorának. Ezeket szokás szórás, vagyis nem kötött sajátállapotoknak nevezni (lásd ?? fejezet). Ezek írják le azt a szituációt, amikor egy részecske, pl. elektron, a végtelenből érkezik szóródik egy centrum pl. atommag által létrehozott potenciálon, majd ismét a végtelenbe távozik valamilyen irányban. A kvantummechanika segítségével ki lehet számítani, hogy milyen irányba mekkora amplitúdóval, illetve valószínűséggel szóródik a részecske. A szórás állapotok, illetve az azoknak megfelelő hullámfüggvények meghatározásával azonban itt nem foglalkozunk.

Az előző szakaszban a kötött állapotokhoz tartozó energiasajátértékek mellett valójában a sajátvektorokat, illetve mivel koordinátareprezentációt használtunk, a sajátfüggvényeket is megadtuk. A radiális egyenletnek adott n esetén n lineárisan független megoldása van, mivel adott n esetén az $n = n_r + \ell + 1$ egyenlőség miatt az $n_r = 0, \ell = n - 1; n_r = 1, \ell = n - 2; \dots n_r = n - 1, \ell = 0$; értékeknek más-más polinom felel meg. Ezeket rendszerint az n és az ℓ értékével indexelik, s így a sajátfüggvények radiális része az előzőek szerint adott n esetén az n számú $\mathcal{R}_{n\ell}(r) = u_{n\ell}(\kappa r)/r$ függvény. Mivel

$$\mathcal{R}_{n\ell}(r) = \frac{u_{n\ell}(\kappa r)}{r} = \frac{(\kappa r)^{\ell+1}}{r} w_{n_r}(\kappa r) e^{-\kappa r}, \quad (40.2)$$

ahol $w_{n_r}(\kappa r)$ egy n_r -ed fokú polinom, az $\mathcal{R}_{n\ell}(r)$ függvény egy $n_r + \ell = n - 1$ fokszámú polinom és az $e^{-\kappa r}$ függvény szorzata.



20. ábra. Az ábrák az elektron magtól mért távolságának valószínűségi sűrűségét mutatják az egyes állapotokban. $(r^2|\mathcal{R}_{nl}(r)|^2)$

A szögektől függő részt is figyelembe véve, a sajátfüggvények alakja

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \frac{u_{nl}(\kappa r)}{r} Y_{\ell}^m(\theta, \varphi). \quad (40.3)$$

Adott n esetén így a lineárisan független, sőt ortogonális sajátfüggvények száma, az adott ℓ értékhez tartozó $2\ell + 1$ számú lehetséges m értéket, azaz különböző gömbfüggvényt is figyelembe véve:

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2. \quad (40.4)$$

Az n főkvantumszámhoz tartozó energiasajátérték ezek szerint n^2 -szeresen elfajult. Valójában azonban – mint tudjuk – az elektronnak van még egy belső szabadsági foka, a sajátimpulzusnyomatéka, másnéven a spinje, amelyre $j = s = 1/2$. A megfelelő mágneses spinquantumszám m_s két értéket vehet föl $\pm 1/2$, és ez a két állapot is ortogonális. Emiatt az elfajulás valójában $2n^2$ -szeres. Másképpen ez azt jelenti, hogy a H, L^2, L_z, S_z itt egy CSCO-t alkot. Az ezeknek megfelelő kvantumszámok, amelyek az állapotot már egyértelműen megadják: n, ℓ, m, m_s .

A (39.8) sajátfüggvény radiális részében szereplő $\varrho = \kappa r$ változóban a κ értékét a fentiek figyelembe vételével beírva, a $Z = 1$ esetén $\kappa_n = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \frac{me_0^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}} = \frac{me_0^2}{\hbar^2} \frac{1}{n}$ a

$$\varrho = \frac{1}{n} \frac{r}{a_0} \quad (40.5)$$

kifejezést kapjuk, ahol az

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me_0^2} \quad (40.6)$$

hosszúság dimenziójú mennyiség neve a Bohr-sugár. Az energiasajátértékeket ezzel kifejezve az

$$\varepsilon_n = -\frac{e_0^2}{2a_0} \frac{1}{n^2} \quad (40.7)$$

eredmény adódik, melynek egy további fölírási módja:

$$\varepsilon_n = -\frac{mc^2}{2} \alpha^2 \frac{1}{n^2}, \quad (40.8)$$

ahol mc^2 az elektron nyugalmi energiája és

$$\alpha = \frac{e_0^2}{\hbar c} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,04} \quad (40.9)$$

(itt q az elektron töltése Coulombban mérve) egy dimenziótlan szám, amelyet Sommerfeld vezetett be és *finomstruktúra állandónak* nevezzük. Az elnevezés arra utal, hogy a H-atom energiaszintjeinek finomabb szerkezetét, amely elsősorban relativisztikus eredetű korrekciókat tartalmaz az elsődleges szerkezethez képest, az α állandó határozza meg. Erről alább még szólnunk.

Az energiaspektrumnak és a sajátfüggvényeknek a fent látott módszerrel történő meghatározása Schrödinger nevéhez fűződik (1926). A történeti hűség kedvéért viszont jegyezzük meg, hogy a spektrumot ugyanebben az évben de néhány hónappal korábban W. Pauli is megkapta egy ahhoz hasonló, de annál bonyolultabb algebrai módszerrel, ahogyan az impulzusmomentum 33. szakaszban tárgyalt általános elméletében a J^2 és a J_z sajátértékeit és közös sajátvektorait meghatároztuk.

A sajátfüggvények explicit alakját megtalálhatjuk számos könyvben vagy az interneten pl. az alábbi címen

<http://panda.unm.edu/courses/finley/P262/Hydrogen/WaveFcns.html>

Itt csak az alapállapot *normált* hullámfüggvényét adjuk meg, melynek alakja


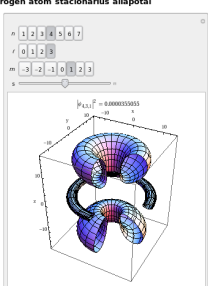
$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-r/a_0}. \quad (40.10)$$

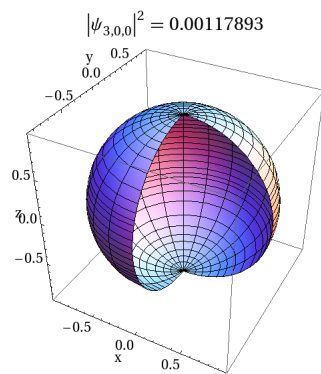
Ez egy gömbszimmetrikus állapot, azaz nem függ a θ, ϕ szögektől. Adott n, ℓ számpárokhoz tartozó ψ_{nlm} állapotok együttesét *héjaknak*, a mellékkvantumszám értéke szerint pedig az $\ell = 0, 1, 2, 3$ értékeknek megfelelő hullámfüggvényeket rendre az *s, p, d, f pályáknak* szokás nevezni. Egy másfajta terminológia szerint az $n = 1$ állapot neve *K* héj, az $n = 2$ az *L* héj, $n = 3$ az *M* héj. Az egyes pályák térbeli struktúráját viszonylag jól szemléltetik a

<http://www.orbitals.com/orb/orbtable.htm>

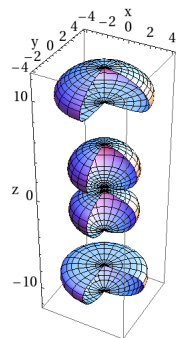
címen megtekinthető ábrák, ahol a piros szín a függvény pozitív a kék a negatív értékét jelzi. Az egyes állapotokat, pályákat a főkvantumszám és a mellékkvantumszám megadásával jelöljük, az n értékét a megfelelő számmal, ℓ értékét pedig a jelzett konvenció szerinti betűvel. Az alapállapot jele teh

át az *1s*, az első gerjesztett állapotok a *2s*, és *2p* pályák, ezután következnek a *3s, 3p, 3d* pályák, stb. Az eddig használt modellben (Coulomb-potenciál) az energia csak az n értékétől függ, a különböző ℓ -hez tartozó állapotok azonos energiájúak.

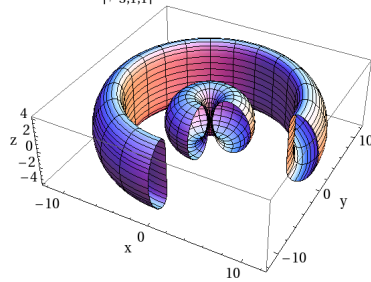
HIDROGÉNATOM STACIONÁRIUS ÁLLAPOTAI		
		<p>Az ábra az elektron megtalálási valószínűségi sűrűségfüggvényének nívófelületeit mutatja a hidrogénatom valamely stacionárius állapotában. Az állapotot az n, l, m kvantumszámok beállításával választhatjuk ki.</p>



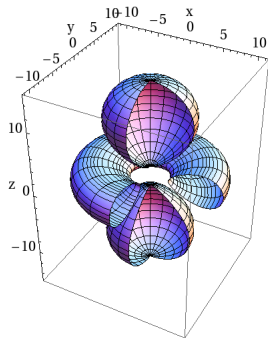
$|\psi_{3,1,0}|^2 = 0.000167032$



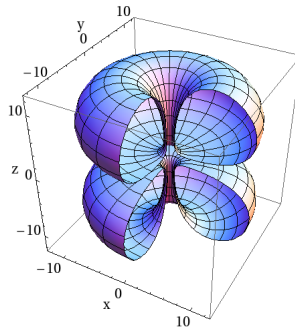
$|\psi_{3,1,1}|^2 = 0.0000835161$



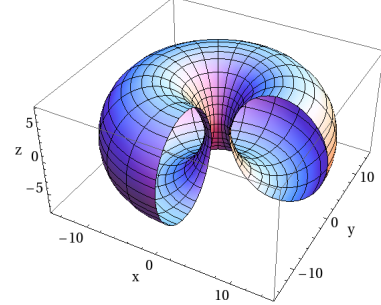
$|\psi_{3,2,0}|^2 = 0.0000767743$



$|\psi_{3,2,1}|^2 = 0.0000287904$



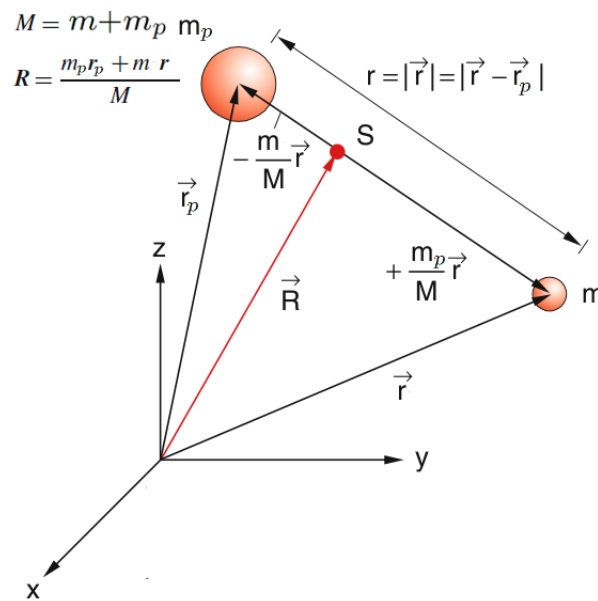
$|\psi_{3,2,2}|^2 = 0.0000287904$



21. ábra. Az elektron megtalálási valószínűségi sűrűségfüggvényének nívófelületei a hidrogénatom $n = 3$ főkvantumszámhoz tartozó stacionárius állapotaiban

A fentiekben már utaltunk rá, hogy a Coulomb-potenciálhoz tartozó (39.2) Hamilton-operátor a valódi hidrogénatomhoz tartozó Hamilton-operátornak csak egy jó közelítése, az ebből fontebb számított spektrumot nevezzük a H-atom elsődleges szerkezetének. Valójában azonban a (39.2) által nem tartalmazott további kölcsönhatások miatt a H-atom tényleges spektruma kissé különbözik a fönti egyszerű eredménytől. A részletek mellőzésével alább röviden felsoroljuk a megfelelő korrekciókat.

1. A H-atom valójában egy kéttest probléma, a proton tömege szigorúan véve nem végtelen. Viszonylag egyszerűen megmutatható, hogy a klasszikus mechanikához hasonlóan a tömegközéppont mozgása és a relatív mozgás szétválaszthatók. A fönti eredményeket ez annyiban befolyásolja, hogy az elektron m tömege helyett mindenütt az $m_r = \frac{mm_p}{m+m_p}$ redukált tömeget kell használni, ahol m_p a proton tömege. Mivel m_p sokkal (1837-szer) nagyobb az elektron tömegénél, ez lényegében alig okoz számszerű változást az eredményekben.

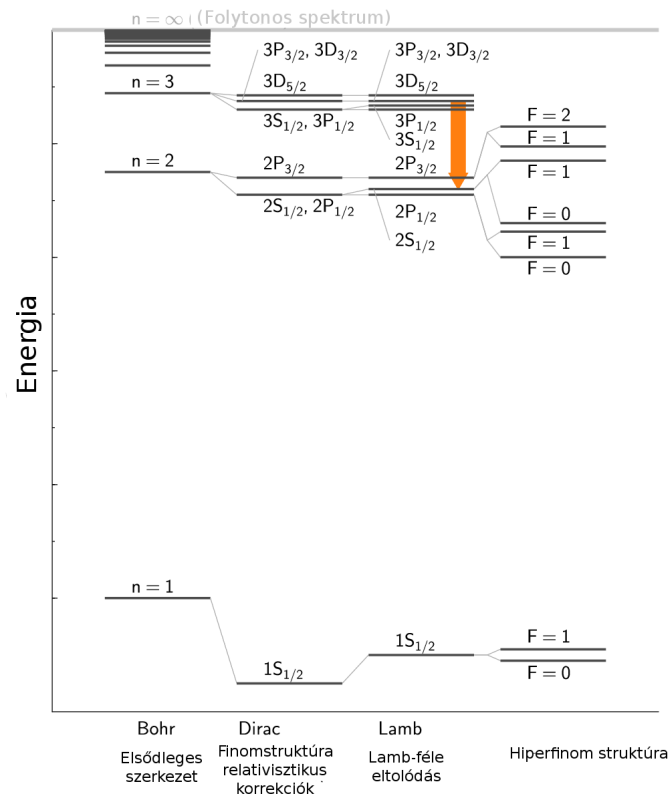


22. ábra. A tömegközépponti koordináták bevezetése

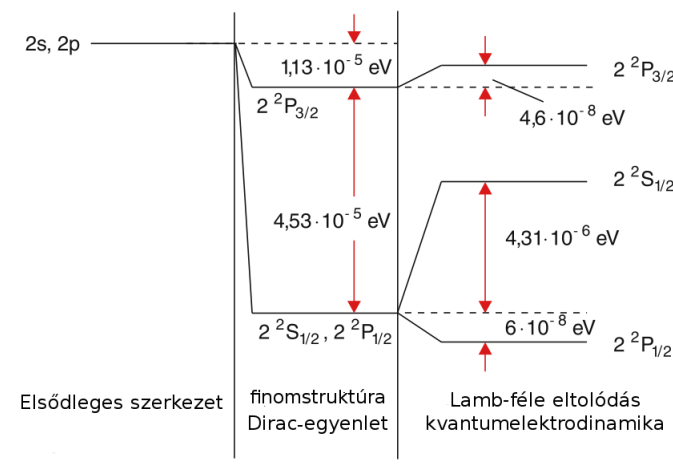
2. Relativisztikus korrekciók. Ezek az elsődleges szerkezetre kapott $1Ry$ nagyságú energiáknál $\alpha^2 \approx 0,53 \times 10^{-4}$ -szer kisebbek, de a degenerációt részben föloldják, azaz az elsődleges energianívók egy finomabb fölbontásban több egymáshoz közeli nívóra hasadnak föl. Ezt nevezzük *finomszerkezetnek*. Relativisztikus esetben ugyanis a H Hamilton-operátor a spintől is függ, és föllép az ún. spin-pálya kölcsönhatás. Ilyenkor a Hamilton-operátorral az elektron pályaimpulzusnyomatéka \mathbf{L} és a spinje \mathbf{S} (komponensenként) külön-külön már nem cserélhetők föl, ezek már nem mozgásállandók. A megmaradó mennyiség ebben az esetben a $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, a teljes impulzusnyomaték operátora. A \mathbf{J}^2 operátor $\hbar^2 j(j+1)$ sajátértékeiben szereplő j kvantumszámról ilyenkor megmutatható, hogy értéke $j = l + 1/2$ illetve $j = l - 1/2$ lehet, ez utóbbi csak akkor, ha $l \neq 0$. A megfelelő állapotot ilyenkor l_j -vel szokás jelölni, ahol az l helyére az s, p, d stb. betűk valamelyikét írjuk az $l = 0, 1, 2$ stb. pályáknak megfelelően. A spin-pálya kölcsönhatás miatt pl. a $p_{1/2}$ illetve a $p_{3/2}$ állapotokhoz tartozó energiák különböznek, mert ekkor az energia már függ j -től. Az energiakülönbség a $2p_{3/2}$ és a $2p_{1/2}$ nívók között kb. 10,9 GHz frekvenciának felel meg. A finomszerkezetnek a kísérleti értékekkel megegyező elméleti leírása a P. Dirac nevéhez fűződő relativisztikus egyenlet alapján lehetséges, amely az elektron spinjéről is első elvek alapján ad számot. A részleteket illetően az atomfizikai, illetve a további kvantummechanikai tanulmányokra utalunk. Érdeemes itt megjegyezni, hogy a finomszerkezet első elméleti leírása A. Sommerfeld nevéhez fűződik, aki a helyes magyarázattal szemben végül is hibásnak bizonyult értelmezéssel jutott mindazonáltal a kísérletekkel megegyező eredményre.

3. Az úgynevezett Lamb-féle eltolódás, amelyet először W. Lambnak sikerült megmérnie 1947-ben. Ez egy kvantumelektrodinamikai effektus, amit ugyancsak 1947-ben H. Bethe magyarázott meg elsőként számítással. Az eltolódás az atomot körülvevő "elektromágneses vákuum" kvantumos tulajdonságainak a következménye. Ennek következtében a $2s_{1/2}$ és a $2p_{1/2}$ állapotok energiája egy kissé különbözővé válik, annak ellenére, hogy a $j = 1/2$ értéke a két állapot esetén ugyanaz, s így a Dirac-elmélet szerint ezek azonos energiájúaknak adódnak. A Lamb-eltolódás nagyságrendje az elsődleges szerkezetnél $\alpha^3 |\ln \alpha| \approx 1,9 \times 10^{-6}$ -szor kisebb, az említett nívók esetén ez 1,057 GHz.

4. A hiperfinom struktúra, amely a mag spinjéhez és az elektron spinjéhez csatolódó mágneses nyomatékok kölcsönhatásából ered, és az $n > 1$ állapotokon a finomstruktúránál kb. 1000-szer kisebb. A hiperfinom kölcsönhatás az $n = 1$ alapállapotot is fölhasítja, ahol ennek mértéke 1420 MHz, jóval nagyobb, mint a gerjesztett állapotok esetén. Az ennek megfelelő 21 cm-es hullámhosszúságú elektromágneses sugárzás kibocsátását lehet megfigyelni a világűrbeli H-atomokon.



23. ábra. Korrekciók a H-atom spektrumához



24. ábra. A korrekciók nagyságrendje $n = 2$; $l = 1$ esetében

41. Többrészecske rendszerek és azonos részecskék

Egy-egy részecske állapotát a korábbiak szerint egy \mathfrak{H} Hilbert-térbeli vektorral adjuk meg. Ha több különböző részecskénk van, akkor a leírásra ezen terek úgynevezett tenzori szorzatát használjuk, amely maga is egy Hilbert-tér. Ezt a következőképpen vezetjük be. Legyen $|\varphi\rangle \in \mathfrak{H}_1$ és $|\psi\rangle \in \mathfrak{H}_2$. Tekintsük először a $|\varphi\rangle|\psi\rangle$ alakú rendezett párok halmazát, amelyeket a $|\varphi\rangle$ és $|\psi\rangle$ tenzori szorzatának nevezünk, szokásos erre a $|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle$ jelölés is. Ezeket az elemeket a $\mathfrak{H}_1 \otimes \mathfrak{H}_2$ -vel jelölt tenzori szorzattér *speciális* elemeinek fogjuk tekinteni. Legyen most $|u_i\rangle$ egy ortonormált bázis \mathfrak{H}_1 -ben és $|v_j\rangle$ egy ortonormált bázis \mathfrak{H}_2 -ben, és legyen $|\varphi\rangle = \sum_i a_i |u_i\rangle$, illetve $|\psi\rangle = \sum_j b_j |v_j\rangle$. A $|\varphi\rangle|\psi\rangle$ szorzatot a $|\varphi\rangle|\psi\rangle = \sum_i a_i |u_i\rangle \sum_j b_j |v_j\rangle$ alakba írva és a szorzásokat tagonként elvégezve a $|\varphi\rangle|\psi\rangle = \sum_{i,j} a_i b_j |u_i\rangle |v_j\rangle$ eredményt kapjuk. Ennek alapján tekinthetjük az $|u_i\rangle |v_j\rangle$ alakú, (vagy $|u_i\rangle \otimes |v_j\rangle$ alakú) rendezett párokat a tenzori szorzattér bázisvektorainak, amely bázisban a $|\varphi\rangle|\psi\rangle$ elem kifejtési együtthatói az $a_i b_j$ alakú szorzatok.

Egy lineáris tér esetén azonban, a bázisvektorok tetszőleges lineáris kombinációjának a tér elemének kell lennie, tehát az $|u_i\rangle |v_j\rangle$ összes lehetséges tetszőleges c_{ij} (komplex) számokkal képezett

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |u_i\rangle |v_j\rangle \quad (41.1)$$

lineáris kombinációját, vagy a bonyolultabb írásmóddal a $|\Psi\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |u_i\rangle \otimes |v_j\rangle$ elemeket is meg kell engednünk ahhoz, hogy az így kapott vektorok valóban lineáris vektorteret adjanak. Ezért a következőkben ezen lineáris kombinációk összességét tekintjük a tenzori szorzattér elemeinek definiációjaként.

Világos azonban, hogy egy ilyen $|\Psi\rangle$ általában nem írható $|\varphi\rangle|\psi\rangle$ alakba, mert ehhez az kellene, hogy tetszőleges c_{ij} számokhoz találjunk egy olyan a_i és b_j számsorozatot, hogy a $c_{ij} = a_i b_j$ minden i -re és j -re teljesüljön, ami általában nem lehetséges.

Ha mind \mathfrak{H}_1 mind \mathfrak{H}_2 véges dimenziós és a dimenziószámok n_1 illetve n_2 , akkor a $\mathfrak{H}_1 \otimes \mathfrak{H}_2$ tenzori szorzattér nyilvánvalóan $n_1 \cdot n_2$ dimenziós. A $c_{ij} = a_i b_j$ alakú fölbontás lehetetlensége tetszőleges c_{ij} esetén ebből már közvetlenül is látszik, hiszen $n_1 \cdot n_2$ számú föltételt $n_1 + n_2$ adattal kellene kielégíteni.

41.1 Feladat: Legyen \mathfrak{H}_1 és \mathfrak{H}_2 is kétdimenziós és legyen ezekben $|u_i\rangle$, illetve $|v_j\rangle$ bázis. Tekintsük a

tenzori szorzattér következő elemét $|\Psi\rangle = c_{11} |u_1\rangle |v_1\rangle + c_{22} |u_2\rangle |v_2\rangle$.

Mutassuk meg, hogy ha pontosan ez a két együttható – c_{11} és c_{22} – nem nulla, akkor nincs olyan $|\varphi\rangle$ és $|\psi\rangle$, aminek ez az elem a tenzori szorzata lenne.

A tenzori szorzattér tehát tartalmazza az egyes terek vektorainak tenzori szorzatát, de annál bővebb, vannak olyan elemei amelyek nem írhatók szorzat alakba.

A $\mathfrak{H}_1 \otimes \mathfrak{H}_2$ -beli belső szorzatot a

$$\left(\sum_{i,j} c_{ij} |u_i\rangle |v_j\rangle, \sum_{k,l} d_{kl} |u_k\rangle |v_l\rangle \right) = \sum_{i,j,k,l} c_{ij}^* d_{kl} \langle u_i | u_k \rangle \langle v_j | v_l \rangle = \sum_{i,j} c_{ij}^* d_{ij} \quad (41.2)$$

előírásnak megfelelően számítjuk ki.

Meg lehet mutatni, hogy a tenzori szorzattér elemeire adott (41.1) definíció, illetve a belső szorzat értéke független a \mathfrak{H}_1 -beli és \mathfrak{H}_2 -beli bázisválasztástól. Ez utóbbi tény arra utal, hogy lehetséges a tenzori szorzattérnek egy eleve bázisoktól független, jóval elegánsabb, de emiatt több absztrakciót igénylő definíciója. Erre vonatkozóan a matematikai irodalomra utalunk.

A kvantummechanikában a tenzori szorzattér elemei között föllépő különbözőség jelentős fizikai különbséget jelent. A $|\varphi\rangle |\psi\rangle$ alakú elemeket szorzatállapotoknak nevezzük, azokat pedig amelyek nem írhatók szorzat alakba, *összefonódott állapotoknak*.

A tenzori szorzattér általános fogalma viszonylag egyszerűen megérthető abból a konkrét példából, amikor a két szóban forgó tér a $\varphi(x_1)$ és $\psi(x_2)$ négyzetesen integrálható függvények tere, amelyek egy-egy részecske x tengely menti elhelyezkedéséhez tartozó valószínűségi amplitúdók. A szorzatállapotok ekkor a $\varphi(x_1)\psi(x_2)$ függvénysszorzatok, míg a teljes tenzori szorzattér elemei az összes – mindkét változójuk szerint négyzetesen integrálható – $\Psi(x_1, x_2)$ kétváltozós függvények. Világos, hogy nem minden ilyen kétváltozós függvény írható $\varphi(x_1)\psi(x_2)$ alakba, de kifejthető az egyes terekben értelmezett $u_i(x_1)$ és $v_j(x_2)$ külön-külön ortonormált bázisfüggvények rendszere szerint.

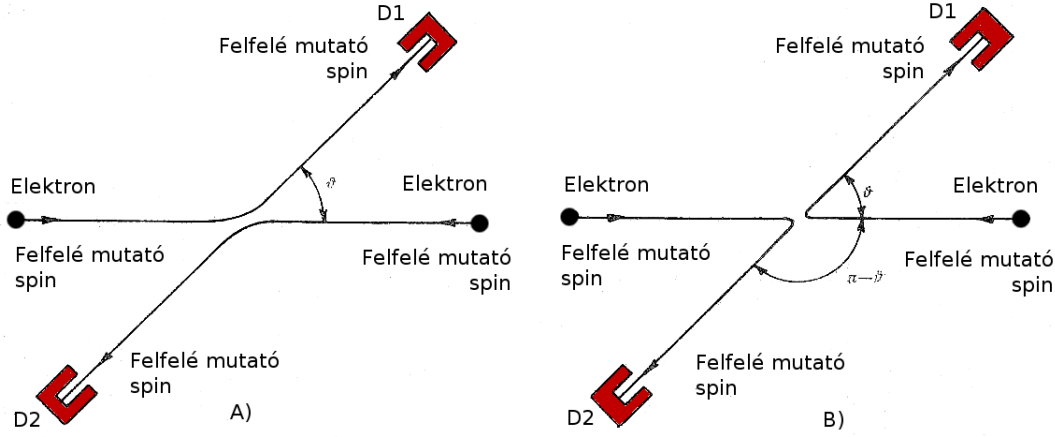
A fönti konstrukció illetve definíció nyilvánvaló módon kiterjeszthető arra az esetre, ha nem két hanem több részecskénk van. Ilyenkor az együttes állapotok $\sum_{i,j,\dots,l} c_{ij\dots l} |u_i\rangle |v_j\rangle \dots |w_l\rangle$ alakúak, azaz az egyes részecskék terében választott ortonormált bázisok szorzatainak lineárkombinációi adják a lehetséges állapotokat.

Mindez azonban csak abban az esetben érvényes, ha a szóban forgó részecskék különbözőek, ami azt jelenti, hogy valamely belső tulajdonságuk szempontjából különböznek. Például egy elektron és egy pozitron különbözik a töltésében, egy elektron és egy müon különböző tömegű stb. Ezek az ún. *megkülönböztethető* részecskék. *Megkülönböztethető részecskék együttes állapottere a megfelelő egyrészecske terek tenzori szorzata.*

A kvantummechanikában azonban vannak *megkülönböztethetelen* részecskék is. Jelenlegi ismeretink szerint pl. két elektron, vagy két foton semmilyen módon nem különböztethető meg. Megjegyezzük, hogy ez a tulajdonság nem azonnal nyilvánvaló egy-egy új részecske fölfedezésénél. Eleinte úgy gondolták, hogy a több különböző folyamatban is keletkező neutrínók is azonosak. Később kiderült, hogy ez nem így van, a neutrínó különbözik az antineutrínótól, illetve léteznek úgynevezett μ -neutrínók és elektron-neutrínók. A proton, a neutron és más erős kölcsönhatásban részt vevő részecskék belső szerkezetét u (up) és d (down) és további kvarkok mint összetevők segítségével lehet megmagyarázni. A továbbiakban világossá vált, hogy az u kvarkok sem mind azonosak, hanem a színtöltésnek nevezett tulajdonságban különböznek egymástól. Az alábbiakban tehát a minden tekintetben azonos részecskékre vonatkozó megfontolásokat tesszünk.

A megkülönböztethetelenség miatt egy érdekes probléma merül föl. Ennek megvilágítására tekintsünk példaként két azonos részecskét és egy olyan kísérletet ahol ezek a laboratóriumban szóródnak egymáson. Legyen a két részecske állapota kezdetben $|1 : p_z; 2 : -p_z\rangle$, ahol $|p_z\rangle$ egy $\hat{\mathbf{z}}$ irányba haladó de Broglie-hullám. Egy pontosabb leírásnál lehet ez egy normálható hullámcsomag

állapot is, amelyben $\langle P \rangle = p_z$. Tegyük föl, hogy a szóródás után az egyes részecskéket a tömegközéppontból nézve az \hat{n} illetve a $-\hat{n}$ egységvektorokkal jelzett irányban detektáljuk.



25. ábra. Azonos részecskék szóródása egymáson

A folyamat kétféleképpen is végbemehet. Az egyik lehetőség szerint az 1. részecske szóródik az \hat{n} irányba és a 2. a $-\hat{n}$ irányba. A másik szerint pedig az 1. részecske szóródik a $-\hat{n}$ irányba és a 2. az \hat{n} irányba. Így a következő kétfajta átmenet lehetséges:

$$|1 : p_z; 2 : -p_z\rangle \longrightarrow |1 : p_n; 2 : -p_n\rangle, \quad (41.3)$$

vagy

$$|1 : p_z; 2 : -p_z\rangle \longrightarrow |1 : -p_n; 2 : p_n\rangle. \quad (41.4)$$

Ez a két végállapot általános értelemben még ortogonális is egymásra. Ha a részecskék megkülönböztethetők, akkor meg lehet mondani, hogy melyik a végállapot. Ha viszont a részecskék megkülönböztethetetlenek, akkor nem tudjuk megmondani, hogy melyik következett be, mert az eddigiek alapján a kettő közül akármelyik is lehet, sőt az is lehet, hogy az igazi végállapot a kettő lineáris kombinációja:

$$|\Psi_f(1, 2)\rangle = c_1 |1 : p_n; 2 : -p_n\rangle + c_2 |1 : -p_n; 2 : p_n\rangle. \quad (41.5)$$

Itt tehát egy fizikai eredményhez (nevezetesen, hogy egy részecske érkezik az \mathbf{n} irányban elhelyezett detektorba és egy a $-\mathbf{n}$ irányban található) végtelen sok különböző állapotvektor is rendelhető. Ezt egyfajta degenerációnak szokás tekinteni, és ezt nevezzük *kicserélődési degenerációnak*. Ez azonban fizikai szempontból nem kielégítő. Egyszerűen meg lehet ugyanis mutatni, hogy a fenti, meghatározott fizikai szituációhoz tartozó állapoton végrehajtott kvantumos mérési eredmény valószínűsége függ az együtthatók választásától. Más szóval, egy meghatározott fizikai szituációban a mérési eredmény valószínűsége nincs egyértelműen meghatározva.

Arra a következtetésre jutunk tehát, hogy a (41.5) képlettel leírt példában az együtthatóknak egyértelműen meghatározottnak kell lenniük. Ezek megválasztására nézve pedig a természet válasza a következő. Az egyértelmű és helyes eredményt bizonyos részecskéknél akkor kapjuk, ha a $|\Psi(1, 2)\rangle$ állapot szimmetrikus a részecskék fölcserélésével szemben, míg a részecskék egy másik osztálya esetén a helyes állapot antiszimmetrikus. Szimmetrikusnak nevezünk egy kétrészecske állapotot, ha a részecskék cseréje esetén az állapotvektor önmagába megy át, antiszimmetrikusnak akkor, ha az állapotvektor előjelet vált. Előrebocsátjuk az eredményt amelyet alább részletesen is elemezni fogunk, majd posztulátumként is ki fogunk mondani. Tapasztalati tény a következő. Ha a megkülönböztethetetlen részecskék spinje egész, akkor az állapotuk szimmetrikus, ha a spinjük feles, akkor antiszimmetrikus. A fenti példában így egész spinű részecskék esetén a $c_1 = c_2$, feles spinűeknél a $c_1 = -c_2$ a helyes választás. Ha az egyes részecskékre vonatkozó állapotok normáltak, s ezt megköveteljük a $|\Psi_f(1, 2)\rangle$ -től is, akkor továbbá $|c_1| = |c_2| = 1/\sqrt{2}$.

Általánosabban is meg fogjuk fogalmazni ezt. Tekintsünk egy állapotot $\mathfrak{H} \otimes \mathfrak{H}$ -ban, ahol most a két Hilbert-tér azonos, mivel a részecskék is azonosak. A föntiek szerint ennek egy általános eleme $\sum_{ij} c_{ij} |u_i u_j\rangle$. Vezessük be a P_{21} fölcserélő operátort, amelynek hatása az, hogy a két részecskét megcseréli, azaz egy konkrét szorzatbázisban történő kifejtés esetén a két bázisvektort átcseréli. Egy tetszőleges állapotról tehát, amelynek alakja egy alkalmas bázisban

$$\sum_{ij} c_{ij} |u_i u_j\rangle \longrightarrow P_{21} \sum_{ij} c_{ij} |u_i u_j\rangle = \sum_{ij} c_{ij} |u_j u_i\rangle. \quad (41.6)$$

Az így definiált P_{21} operátort kétszer alkalmazva nyilván visszakapjuk az eredeti állapotot, ezért $P_{21}^2 = 1$. A P_{21} emellett önadjungált operátor is, mivel az $|u_i u_j\rangle$ bázison a mátrixelemeinek alakja

$$(|u_{i'} u_{j'}\rangle, P_{21} |u_i u_j\rangle) = (|u_{i'} u_{j'}\rangle, |u_j u_i\rangle) = \delta_{i'j} \delta_{j'i}, \quad (41.7)$$

ami megegyezik a P_{21}^\dagger

$$(|u_{i'} u_{j'}\rangle, P_{21}^\dagger |u_i u_j\rangle) = (P_{21} |u_{i'} u_{j'}\rangle, |u_i u_j\rangle) = (|u_j u_{i'}\rangle, |u_i u_j\rangle) = \delta_{j'i} \delta_{i'j} \quad (41.8)$$

mátrixelemeivel, s így az önadjungáltság föltétele – a linearitás miatt – ezen báziselemek minden lineáris kombinációjára, azaz tetszőleges vektorra fönnáll. Így

$$P_{21}^\dagger = P_{21}. \quad (41.9)$$

A fönti két tulajdonságból következik, hogy

$$P_{21}^\dagger P_{21} = P_{21} P_{21}^\dagger = 1, \quad (41.10)$$

vagyis P_{21} unitér is.

Vizsgáljuk P_{21} sajátvektorait. Ezekre $P_{21}\Phi = \lambda\Phi$. Mivel $P_{21}^2\Phi = \Phi = \lambda^2\Phi$, láthatólag $\lambda = \pm 1$. Azok a sajátvektorok, amelyekre $\lambda = 1$ a szimmetrikus vektorok, azok pedig amelyekre $\lambda = -1$ az antiszimmetrikusak. Vezessük be az

$$S = \frac{1}{2}(1 + P_{21}) \quad \text{és az} \quad A = \frac{1}{2}(1 - P_{21}) \quad (41.11)$$

szimmetrizáló és antiszimmetrizáló operátorokat. Érvényesek a következő állítások: S és A önadjungált és idempotens operátorok, tehát projekciók. Egymásra ortogonális alterekre vetítetnek, mert

$$SA = AS = 0. \quad (41.12)$$

Továbbá

$$P_{21}S = P_{21}\frac{1}{2}(1 + P_{21}) = S, \quad (41.13)$$

illetve

$$P_{21}A = P_{21}\frac{1}{2}(1 - P_{21}) = -A. \quad (41.14)$$

Ezek a $\mathfrak{H} \otimes \mathfrak{H}$ szimmetrikus, illetve antiszimmetrikus alterei.

Vegyünk most egy tetszőleges vektort, alkalmazzuk rá S -et, akkor ez P_{21} szimmetrikus sajátvektora, illetve A -t amely P_{21} antiszimmetrikus sajátvektora. Valóban

$$P_{21}S\Psi = S\Psi, \quad P_{21}A\Psi = -A\Psi. \quad (41.15)$$

Továbbá a két tér direkt összege kiadja a teljes teret, mert

$$S + A = 1, \quad (41.16)$$

ami másképpen azt jelenti, hogy tetszőleges kétrészecske állapot egyértelműen fölbontható egy szimmetrikus és egy antiszimmetrikus állapot összegére:

$$\Psi = \frac{1}{2}(1 + P_{21})\Psi + \frac{1}{2}(1 - P_{21})\Psi = \Psi_s + \Psi_a, \quad (41.17)$$

ahol Ψ_s és Ψ_a ortogonálisak egymásra.

Bonyolultabb a helyzet akkor, ha a részecskék N száma több mint 2. Ennek az esetnek a tárgyalásához fölidézzük a permutációk fogalmát. N db különböző objektum – az alábbiakban az első N természetes szám – különböző lehetséges sorrendekbe való rendezését nevezzük permutációknak. Egy permutáció a következő

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & N \\ k_1 & k_2 & \dots & k_N \end{pmatrix}, \quad (41.18)$$

vagy csak egyszerűen

$$(k_1 k_2 \dots k_N), \quad (41.19)$$

ahol $(k_1 k_2 \dots k_N)$ az első N szám egy más sorrendben való fölírását jelenti. A lehetséges permutációk száma $N!$ és az egyes permutációkat α betűvel is fogjuk jelölni, ahol α valamilyen $(k_1 k_2 \dots k_N)$ permutációt jelent. Ismeretes, hogy értelmezhetjük a permutációk kompozícióját vagy szorzatát és, hogy a permutációk algebrai értelemben csoportot alkotnak, amelyet szimmetrikus csoportnak nevezünk. Minden permutáció megadható mint párok fölcserélésének, más néven transzpozíciójának egymásutánja, azaz szorzata. Egy permutáció többféleképpen is előállítható transzpozíciók szorzataként, de egy adott N esetén minden permutáció két osztályba sorolható, a páros és a páratlan permutációk közé, azaz beszélhetünk a permutáció paritásáról. A páros permutációk azok, amelyeket az eredeti $(1, 2, 3, \dots, N)$ sorozatból a számok páros számú fölcserélésével érhetünk el, míg páratlanok azok, amelyeknél ezen fölcserélések száma páratlan. Noha a fölcserélések száma, mint említettük többféle is lehet, ezen számok paritása, azaz páros vagy páratlan volta egyértelműen meghatározott egy adott permutáció esetén. A páros és páratlan permutációk száma minden adott N esetén ugyanannyi: $N!/2$.

Ilyen módon minden α permutációhoz hozzárendelhetünk egy $\varepsilon_\alpha = (-1)^c$ számot, ahol c az $(1, 2, 3, \dots, N)$ sorrendből az adott α permutáció eléréséhez szükséges cserék száma. $\varepsilon_\alpha = +1$, ha a permutáció páros és $\varepsilon_\alpha = -1$ ha páratlan. Rendeljünk hozzá ezek után minden α permutációhoz egy P_α operátort a következőképpen

$$\alpha = (k_1 k_2 \dots k_N) \longrightarrow P_{(k_1 k_2 \dots k_N)} = P_\alpha, \quad (41.20)$$

$$P_{(k_1 k_2 \dots k_N)} \sum c_{i_1 i_2 \dots i_N} |u_{i_1} u_{i_2} \dots u_{i_N}\rangle = \sum c_{i_1 i_2 \dots i_N} |u_{i_{k_1}} u_{i_{k_2}} \dots u_{i_{k_N}}\rangle. \quad (41.21)$$

Megmutatható, hogy a P_α operátorok unitérek, de nem önadjungáltak. Ez utóbbi onnan látható, hogy két permutáció (pl. két transzpozíció) szorzata nem ugyanaz fordított sorrendben. A transzpozíciók önadjungáltak, szorzatuk viszont csak akkor, ha fölcserélhetők, s ez utóbbi általában nem áll fönn.

Vezessük be az

$$S = \frac{1}{N!} \sum_\alpha P_\alpha \quad (41.22)$$

és az

$$A = \frac{1}{N!} \sum_\alpha \varepsilon_\alpha P_\alpha \quad (41.23)$$

operátorokat. Ezekről viszont megmutatható, hogy önadjungáltak: $S^\dagger = S$, $A^\dagger = A$ és idempotensek, $S^2 = S$, $A^2 = A$, tehát projekciók. S és A egymásra most is ortogonális, azaz $SA = AS = 0$, de összegük – az $N = 2$ eset kivételével – nem adja ki az egységet. Az S operátor sajátvektorai alkotják a tenzorszorzat tér teljesen szimmetrikus alterét, az A operátoré az antiszimmetrikus alteret.

Vannak azonban olyan – ezekre ortogonális – alterek, amelyek sem nem szimmetrikusak sem nem antiszimmetrikusak, kivéve ha csak két részecskéről van szó.

A permutációcsoport tulajdonságai alapján be lehet látni, hogy tetszőleges α_0 permutáció esetén

$$P_{\alpha_0}S = S, \quad P_{\alpha_0}A = \varepsilon_{\alpha_0}A. \quad (41.24)$$

Ez utóbbi egyenlőségek közül az első szerint bármilyen Ψ állapotra $P_{\alpha_0}S\Psi = S\Psi$. Vagyis az S sajátalterében lévő állapotban a részecskék tetszőleges cseréje esetén a vektor nem változik, ezért is nevezzük ezt az alteret szimmetrikusnak. A második egyenlőség szerint pedig, az antiszimmetrikus alter egy állapotán végrehajtott permutáció nyomán az állapot nem változik, ha a permutáció páros, de előjelet vált, ha a permutáció páratlan, így speciálisan minden csere is előjelváltáshoz vezet.

A több részecskerendszerben értelmezett lineáris operátorok általános alakja $B(1, 2, \dots, N)$, ahol a számok egyszerűen azt jelentik, hogy az operátor valamilyen módon hat az első, a második stb. részecske koordinátáira (a koordináta szót itt most megfelelő általános értelemben értjük). Speciális esetként tekintsük a Hamilton-operátort. Ha a részecskék azonosak, akkor a H operátor nem változhat, ha bármely két részecskét egymással fölcserélünk, s így akkor sem, ha azok bármely permutációját vesszük. Emiatt

$$\begin{aligned} P_\alpha H(1, 2, \dots, N) \Psi(1, 2, \dots, N) &= H(\alpha(1, 2, \dots, N)) \Psi(\alpha(1, 2, \dots, N)) = \\ &= H(1, 2, \dots, N) P_\alpha \Psi(1, 2, \dots, N). \end{aligned} \quad (41.25)$$

A fenti egyenlőségből látható, hogy a $H(1, 2, \dots, N)$ operátor fölcserélhető a P_α permutációs operátorokkal. Ezért a H -t és minden ilyen tulajdonsággal bíró operátort szimmetrikusnak nevezünk.

Most már kimondhatjuk a posztulátumot, amely föloldja a korábban látott kicserélődési degenerációt:

7. Posztulátum:

*Több azonos részecskéből álló kvantumrendszer állapottere a $\mathfrak{H} = \mathfrak{H} \otimes \mathfrak{H} \otimes \dots \otimes \mathfrak{H}$ tenzori szorzat Hilbert-térnek a részecskék fajtájától függően vagy a teljesen szimmetrikus, vagy a teljesen antiszimmetrikus altere. Azokat a részecskéket, amelyek állapottere a szimmetrikus alter bozonoknak (*S. Bose indiai fizikus nevéből*), amelyeké az antiszimmetrikus alter, azokat fermionoknak (*E. Fermi nevéből*) nevezzük. A tapasztalat szerint ha a kérdéses részecskék sajátimpulzusmomentumát, spinjét egész j ($0, 1, 2, \dots$) kvantumszám adja meg, akkor a részecskék bozonok, ha pedig félegész j ($1/2, 3/2, \dots$) kvantumszám, akkor fermionok.*

Ezt a posztulátumot a tapasztalat alapján lehet megállapítani. Alább látni fogjuk, hogy milyen fizikai tények szólnak az érvényessége mellett. A kvantummechanikán túlmutató kvantumtérelmélet keretén belül ez – az úgynevezett spin és statisztika kapcsolatáról szóló tétel – további megalapozást is kap.

42. Független részecskék

Sokszor előfordul, hogy egy sokrészecskerendszert úgy kezelünk, mintha az egyes részecskék között nem lenne kölcsönhatás. Ez egzakt például üregbeli elektromágneses mezőt reprezentáló fotonok esetén, amelyek között nincs kölcsönhatás. Sok esetben azonban közelítőleg igaznak tekinthető pl. elektronok vagy más részecskék esetében is, ha azok térfogati sűrűsége nem túlságosan nagy. Ekkor – az előző szakaszban tárgyaltak szerint – a több részecskerendszerbeli állapotok egyrészecskeállapotok, azaz az egyes Hilbert-térbeli elemek tenzorszorzatainak speciális lineáris kombinációiként írhatók föl, mert van értelme külön-külön egyrészecske állapotokról is beszélni.

Vizsgáljuk először két részecske esetét. Tegyük föl, hogy tudjuk, hogy két részecske esetén az egyik a $|\varphi\rangle$ a másik a $|\chi\rangle$ állapotban van, akkor a szimmetrizálási posztulátumnak megfelelő fizikai állapot bozonok esetén

$$|\Psi\rangle = \mathcal{N}(|\varphi\rangle|\chi\rangle + |\varphi\rangle|\chi\rangle), \quad (42.1)$$

fermionok estén

$$|\Psi\rangle = \mathcal{N}(|\varphi\rangle|\chi\rangle - |\varphi\rangle|\chi\rangle), \quad (42.2)$$

ahol \mathcal{N} a normálási tényező. Ha $|\varphi\rangle$ és $|\chi\rangle$ ortogonális \mathcal{N} éppen $1/\sqrt{2}$. Abban a speciális esetben, amikor $|\varphi\rangle = |\chi\rangle$, a bozonokra a $|\varphi\rangle|\varphi\rangle$ az eredmény, amely nyilvánvalóan szimmetrikus, fermionokra viszont 0, azaz két fermion nem lehet ugyanabban az egyrészecske állapotban. Ezt nevezzük Pauli-elvnek.

N független részecske esetén, ha az egyrészecske állapotok $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_N\rangle$, akkor fermionok esetén a megfelelő teljesen antiszimmetrikus állapot egy determináns:

$$|\Psi\rangle = \mathcal{N} \begin{vmatrix} |1:\varphi_1\rangle & |2:\varphi_1\rangle & \dots & |N:\varphi_1\rangle \\ |1:\varphi_2\rangle & |2:\varphi_2\rangle & \dots & |N:\varphi_2\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |1:\varphi_N\rangle & |2:\varphi_N\rangle & \dots & |N:\varphi_N\rangle \end{vmatrix}, \quad (42.3)$$

amelyet Slater-determinánsnak nevezünk. Itt egy elem $|k:\varphi_j\rangle \equiv |\varphi_j(k)\rangle$ azt jelenti, hogy a k -adik részecske a $|\varphi_j\rangle$ egyrészecske állapotban van. Ha a determinánsban bármely két egyrészecske állapot megegyezik, akkor a determináns megfelelő sorai is megegyeznek, amiből következik, hogy a determináns 0, s így ilyen állapot nem lehetséges. Így ismét a Pauli-elvet kaptuk, amely tehát a fermionokra vonatkozó antiszimmetrizálási posztulátum speciális esete.

Tekintsük most az N db független, tehát nem kölcsönható részecske $H(1, 2, \dots, N)$ Hamilton-operátorát. Mivel nincs kölcsönhatás, a H szükségképpen az egyes részecskék Hamilton-operátorának összege:

$$H(1, 2, \dots, N) = \sum_{i=1}^N h(i), \quad (42.4)$$

ahol minden $h(i) = h$ azonos alakú, mert a részecskék azonosak. Oldjuk meg h sajátértékproblémáját:

$$h|\varphi_k\rangle = \varepsilon_k|\varphi_k\rangle. \quad (42.5)$$

Ekkor a teljes H

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (42.6)$$

sajátértékproblémájának megoldásai lesznek a

$$|\Psi\rangle = |\varphi_{k_1}(1)\rangle|\varphi_{k_2}(2)\rangle\dots|\varphi_{k_N}(N)\rangle \quad (42.7)$$

alakú vektorok a tenzori szorzattérben, ahol a $|\varphi_{k_j}(1)\rangle \equiv |1:\varphi_{k_j}\rangle$ állapot valamilyen megoldása a fönti (42.5) úgynevezett egyrészecske-egyenletnek, és a H megfelelő energiasajátértékei $E = \varepsilon_{k_1} + \varepsilon_{k_2} + \dots + \varepsilon_{k_N}$. A (42.7) tenzori szorzatként írt, matematikailag helyes megoldás azonban általában nem teljesíti a szimmetria vagy antiszimmetria követelményét. Azaz ahhoz a követelményhez, hogy (42.7) egy fizikai állapotnak megfelelő valódi sajátvektor, vagy az S operátor (bozonok), vagy az A operátor (fermionok) sajátvektorának is kell lennie. Ezért egy tetszőleges sajátvektort szimmetrizálni, vagy antiszimmetrizálni kell. Az előzőek szerint ehhez a fönti $|\Psi\rangle$ -re alkalmazzuk az S , illetve az A operátort, s mivel H és minden P_α fölcserélhetők ld. 41. szakasz, világos, hogy bármely P_α permutációs operátort alkalmazva a $|\Psi\rangle$ vektorra az eredmény ismét ugyanezen E sajátértékhez tartozik, s ugyanez igaz a permutációk S vagy A típusú lineáris kombinációira is. Az így kapott $S|\Psi\rangle$, illetve $A|\Psi\rangle$ vektorok tehát azon kívül, hogy H sajátvektorai teljesítik a megfelelő szimmetrizálási posztulátumot is.

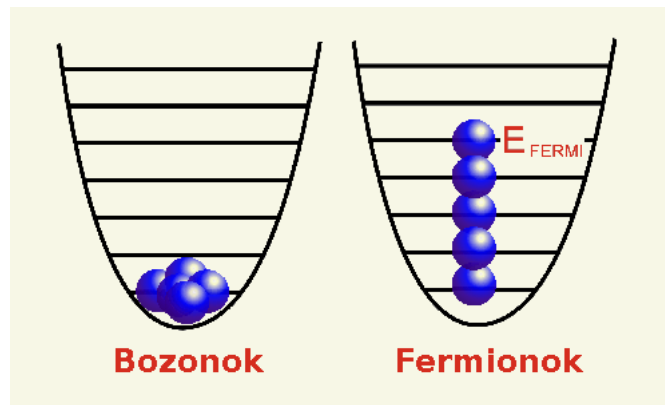
42.1. Azonos független részecskék alapállapotai

Alapállapotnak a kvantumrendszer legalacsonyabb energiájú állapotát nevezzük. (A környezetével termikus egyensúlyban lévő rendszer elegendően mély hőmérsékleten ebben az állapotban található.) Az előző alponban mondottak szerint, a bozonok esetében a független részecskékből álló

sokrészecskerendszer legalacsonyabb együttes energiája nyilvánvalóan egy olyan állapothoz tartozik, amelyben minden egyes részecske a legalacsonyabb – itt ε_0 -al jelölt – energiájú $|\varphi_0\rangle$ egyrészecske állapotban van. Azaz a teljes Ψ állapot

$$\Psi = |\varphi_0(1), \varphi_0(2), \dots \varphi_0(N)\rangle, \quad (42.8)$$

amely természetesen szimmetrikus, és a hozzá tartozó teljes energia $E = N\varepsilon_0$. Tömeggel rendelkező részecskék közül az alkáli atomok (Na, Rb) ritka gázában sikerült 1995-ben lényegében ilyen állapotot nagyon mély hőmérsékleten létrehozni, ezt nevezzük Bose-Einstein kondenzációnak. A kondenzáció csak olyan esetben történik, meg ha a gázt alkotó részecskék egész spinűek. Ez a gáz ilyenkor egy úgynevezett BEC (Bose-Einstein condensate), amelynek létezését először Einstein jósolta meg 1925-ben. (Bose nevéhez valójában a Planck-törvénynek egy olyan levezetése fűződik, amelyben a fotonok – mint megkülönböztethetetlen részecskék – ideális gázára vonatkozó statisztikus fizikai megfontolást használt. Einsteint ez vezette arra a kérdéskörre, hogy mi történik hasonló esetben tömeggel rendelkező részecskékkel). Érdekes módon felez spinű atomok gázában is sikerült hasonló állapotot létrehozni, de ekkor, még a kondenzáció előtt, az atomok párokba rendeződnek, s mivel egy pár együtt már egész spinű, a kondenzáció lehetővé válik.



26. ábra. Azonos független részecskékből álló kvantumrendszer alapállapotban. A bozonok esetén minden részecske a legalacsonyabb energiájú egyrészecske állapotban található. Fermionok esetében az antiszimmetriából következő kizárási elv szerint egy-egy egyrészecske állapotban csak egyetlen részecske lehet.

A fermionok esetében a legalacsonyabb energiájú állapot egy olyan föntebb látott (42.3) Slater-determináns lesz, amelyben a $|\varphi_{k_j}\rangle$ állapotok mind különbözőek (egyébként a determináns eltűnne), de a hozzájuk tartozó egyrészecske energiák nem szükségképpen különbözőek, mert az ε_k egyrészecske energiák elfajultak is lehetnek, s így különböző ortogonális állapotokban azonos energiával lehetnek a részecskék. Legyenek az egyrészecske-probléma ε_k sajátértékei növekedésük sorrendjében indexelve, azaz

$$\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_2 \dots, \quad (42.9)$$

és legyenek a megfelelő elfajultsági indexek g_0, g_1, g_2, \dots . Ekkor a legalacsonyabb teljes energia úgy valósul meg, hogy a részecskék a lehetséges legalacsonyabb egyrészecske energiaértékkel bíró állapotokat töltik be, de ez legföljebb annyi részecskét jelenthet, ahányszor a kérdéses ε nivå elfajult. Így a teljes rendszer alapállapot (legalacsonyabb) energiája

$$E_0 = g_0\varepsilon_0 + g_1\varepsilon_1 + \dots + g_{n-1}\varepsilon_{n-1} + (N - \sum_{k=0}^{n-1} g_k)\varepsilon_n, \quad (42.10)$$

ahol n az a legkisebb egész szám amelyre $g_0 + g_1 + \dots + g_n \geq N$.

Ha a teljes rendszer alapállapotban van, azaz energiája E_0 , akkor a legmagasabb még betöltött állapothoz tartozó $\varepsilon_n = \varepsilon_F$ energiát Fermi-energiának nevezzük, amely elsősorban a makroszkopikus szilárd testekben pl. fémekben és félvezetőkben mozgó elektronok viselkedésének leírásánál játszik fontos szerepet. Mivel ezekben az anyagokban szobahőmérsékleten $\varepsilon_F \gg kT$, ezért termikus okokból az összes elektron közül csak olyan számú gerjesztődik, ahány az ε_F vagy annál mintegy kT -vel kisebb energiával rendelkezik. Ez a szám egy makroszkopikus szilárd test esetén sok nagyságrenddel kisebb mint N , aminek a termikus tulajdonságok szempontjából érdekes következményei vannak. Erről részletesebben a statisztikus fizikai tanulmányok során lesz szó.

43. Többelelektronos atomok

A korábbiakban már jeleztük, hogy a különböző korrekciók miatt az elsődleges szerkezeten túl már a legegyszerűbb atom, az egy elektront tartalmazó hidrogén spektruma is bonyolult finomszerkezetet mutat. Első közelítésben azonban a spektrum egyszerű, az energia az $\varepsilon_n = (-1/n^2) Ry$ képlet szerint csak az n főkvantumszámtól függ, és ez az energiaérték $2n^2$ -szeresen degenerált.

A többelelektronos atomok esetén szigorúan véve csak a sok elektron együttesének a mag és egymás terében létrejövő stacionárius állapotairól lehetne beszélni. Ezek egy Z rendszámú és így Z elektront tartalmazó atom esetén a

$$\left(\sum_{i=1}^Z \frac{\mathbf{P}_i^2}{2m_e} - \sum_{i=1}^Z \frac{Zq_0^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{R}_i|} + \frac{q_0^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j \neq i} \sum_{i=1}^Z \frac{1}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} \right) \psi(1, 2, \dots, Z) = E\psi(1, 2, \dots, Z) \quad (43.1)$$

energiasajátérték-egyenlet megoldásai, amelyben a magot mozdulatlanak tekintjük. Itt az elektronok közötti – a harmadik tag által leírt – kölcsönhatás ellenére, az atomban megfelelő pontossággal működik a függetlenrészecske-közelítés, azaz használható az egyes elektronok állapotának fogalma. Egy adott elektronra hat a mag vonzása és az összes többi elektron taszítása. A kiválasztott elektronra az utóbbiak hatását egy úgynevezett *effektív potenciállal* vesszük figyelembe. Tehát csak egyetlen elektron sajátértékproblémáját oldjuk meg ebben az effektív potenciáltérben. Ezt nevezzük *egyelektron-közelítésnek*, melynek H_{eff} Hamilton-operátora:

$$H_{\text{eff}} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m_e} + V_{\text{eff}}(\mathbf{R}) \quad (43.2)$$

alakú. Atomok esetében föl lehet tételteni, hogy a V_{eff} effektív potenciál gömbszimmetrikus, azaz a kiválasztott elektron szempontjából a többi elektron töltéssűrűsége is átlagban gömbszimmetrikus a mag körül. Ez a föltételezés meglepően jól működik, ami mutatja ennek a képnek a fizikai jogosságát. A kiválasztott elektron effektív Hamilton-operátorát így a következő alakba írhatjuk:

$$H_{\text{eff}} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m_e} - \frac{q_0^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z(R)}{R}, \quad (43.3)$$

ahol $Z(r)q_0$ az elektron által "érezelt" effektív töltés, ha az elektron a magtól r távolságra van és $Z(r) \rightarrow Z$ ha $r \rightarrow 0$, azaz a mag közelében, és $Z(r) \rightarrow 1$, ha $r \rightarrow \infty$. Az utóbbi esetben a többi $Z-1$ elektron *leárnýékolja* a Zq_0 töltésű mag hatását így az $r \rightarrow \infty$ esetben az elektron egy pontszerű q_0 pozitív elemi töltés potenciáljában mozog. Az operátort természetesen az $r \rightarrow R$ helyettesítéssel kapjuk.

Az egyes elektronok a többi elektron és a mag gömbszimmetrikusnak tekinthető terében mozognak és így a pályák hasonlóan jellemezhetők, mint a hidrogén állapotai. A gömbszimmetria miatt az L^2 és az L_z fölcserélhetők H_{eff} -el, így ezek sajátértékei, azaz az ℓ és az m jó kvantumszámok. Egy stacionárius állapotot első közelítésben így az energiasajátérték (főkvantumszám) mellett, az ℓ és m , továbbá az m_s spinquantumszám-vetület jellemez. Ez utóbbi triviálisan azért, mert a H_{eff} a spintól független, tehát a spinvetület operátorával is fölcserélhető. A H_{eff} sajátállapotait egyelektron

állapotoknak, másnéven pályáknak szokás nevezni, de ez nem jelent semmiféle klasszikus pályát. A megfelelő sajátértékeket egyelektron energiáknak, vagy pályae energiának hívjuk.

A H-atomban a pályae energiák n növelésével nőnek és ℓ -től függetlenek. A többelektronos atomokra a helyzet bonyolultabb, mert az elektron-elektron kölcsönhatás miatt a pályae energiák az ℓ -től is függenek, azaz *megszűnik* az a Coulomb-térben érvényes elfajulás, hogy egy adott n főkvantumszámhoz tartozó de különböző mellékkvantumszámmal ($\ell = 0, 1, 2 \dots n-1$) jelzett állapotok azonos energiájúak. A mellékkvantumszám értékétől függően ezeket az állapotokat a H-atomhoz hasonlóan az alábbi megfeleltetés szerinti

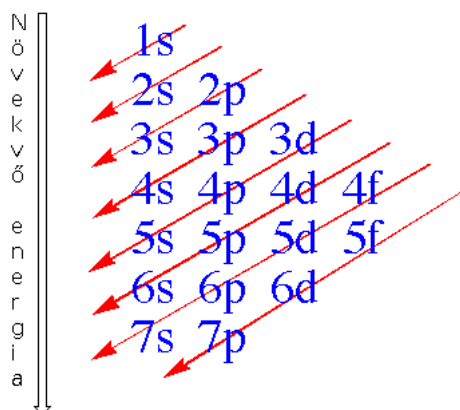
$$\begin{array}{cccccc} \ell = & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & \dots \\ & s & p & d & f & g & \dots \end{array} \quad (43.4)$$

betűkkel szokás jelölni. Ezek szerint van szó $1s, 2s, 2p, 3s$, stb. pályákról, ezek energiája tehát egy többelektronos atomnál már függ az ℓ értékétől is. Ezért a pályákat az n főkvantumszámmal és a pályaimpulzusnyomatékukra jellemző ℓ mellékkvantumszámmal szoktuk megadni. A gömbszimmetria miatt viszont az adott n, ℓ -hez tartozó energiaérték még a pályaimpulzusmomentum értékének valamely tengely (általában a z tengely) irányára tekintett vetülete (mágneses kvantumszám értéke) szerint $(2\ell + 1)$ -szer, az elektron saját feles spinje miatt pedig még kétszeresen, tehát együttesen $2(2\ell + 1)$ -szeresen degenerált. (Relativisztikus okokból a H-atomhoz hasonlóan valójában ezek között is van csekély energiakülönbség, ez a finomszerkezet).

A számítások eredményei szerint a tapasztalattal egyezően adott ℓ esetén a nagyobb n -hez nagyobb energia és adott n esetén szintén nagyobb ℓ -hez nagyobb energia tartozik. Egy adott n -hez tartozó állapotokat héjaknak is szokás nevezni. A pályae energiák szerint növekvő sorrend a következő:

$$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p, \quad (43.5)$$

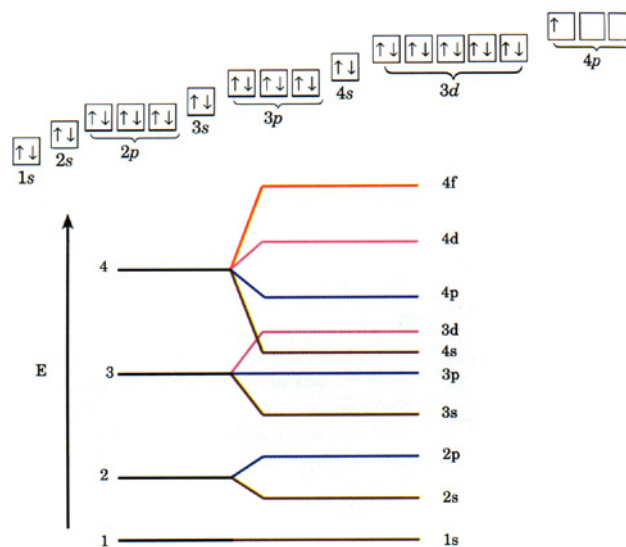
melyet a 27. ábráról lehet leolvasni a nyílak mentén felülről lefelé haladva.



27. ábra. Az egyes atomi pályák sorrendje növekvő energiák szerint

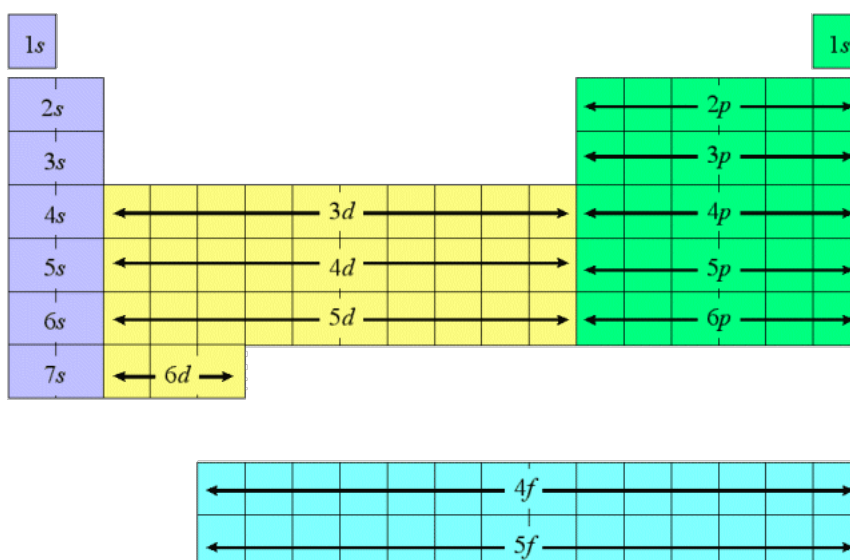
Alapállapotban a Z számú elektron azt a Z db egyrészecske állapotot tölti be, amelyek energiái a fenti ábra szerint követik egymást. Az alapállapot ebben az egyrészecske-közelítésben a megfelelő Slater-determinánssal adható meg. Ezt szokás úgy megfogalmazni, hogy a *Pauli-elvnek* megfelelően a legkisebb energiájú egyelektron állapotokba rendre egy-egy elektront teszünk.

Egy atom elektronkonfigurációján azt értjük, hogy az egyes pályákon, illetve a hozzájuk tartozó energián hány elektron található. Ha egy adott n -el és ℓ -el jellemzett pályán több elektron van, akkor ezeket az ℓ -et jelző betű kitevőjeként írjuk. A H-atom alapállapota $1s$ a He-atomban lévő két elektron alapállapota $1s^2$ konfigurációnak felel meg. A He legelső gerjesztett állapota $1s2s$ konfigurációjú. A periódusos rendszer következő eleme a Li, 3 elektronnal, amelyek közül az alapállapot $1s^22s$ konfigurációnak felel meg, és ez folytatódik a 10-es rendszámú neonig, amelynek konfigurációja $1s^22s^22p^6$, mert a p pályákra legföljebb 6 elektron tehető a Pauli-elv miatt. A fenti 27. ábrából



28. ábra. Az egyes atomi pályák energiája

az is látható, hogy a $3p$ után már nem a $3d$ hanem a $4s$ pálya betöltése következik, ez a kálium és a kalcium külső elektronhéja, amelynek kicsit kisebb az energiája, mint a $3d$ pályáé. A további részleteket illetően atomfizika könyvekre utalunk.



29. ábra. Külső elektronhéjak a periódusos rendszerben

2. TESZTSOROZAT