Benedict Mihály

Kvantummechanika

számítógépes animációkkal

I. RÉSZ

Animációk, feladatok, ábrák, tesztek:

Czirják Attila

Dömötör Piroska

Földi Péter

Szegedi Tudományegyetem

Elméleti Fizikai Tanszék

Szeged 2010

ELŐSZÓ

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

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

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

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

SZÜKSÉGES PROGRAMOK	
	Az interaktív tartalmak egy részének megjelenítéséhez szükséges a **java környezet (JRE)** letöltése és telepítése. A bal oldali linkre kattintva letölthetjük az operációsrendszerünknek 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 letöltjük az ingyenesen elérhető **VLC Media Player**-t. Ez a program rendkívül sokféle videó- és hang formátumot kezel, többek között az flv formátumú videókat is lejátsza.

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

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

Tartalomjegyzék

1. Az üregsugárzás törvényei **4**
1.1. A Wien-féle eltolódási törvény és a Stefan-Boltzmann törvény 4
1.2. A hullámhossz szerinti eloszlás magyarázata 5

2. A fotonhipotézis, a fény részecske természete **9**
2.1. A fotoeffektus vagy fényelektromos hatás 9
2.2. A foton impulzusa 11
2.3. A Compton-effektus 11
2.4. A gravitációs vöröseltolódás 13
2.5. A foton impulzusnyomatéka 13

3. Atomok vonalas színképe, a Bohr-féle posztulátumok és a hidrogénatom Bohr-modellje **14**
3.1. A Bohr-féle posztulátumok 16
3.2. A hidrogénatom Bohr-féle modellje 16

4. Feles spin és fotonpolarizáció **21**
4.1. Stern-Gerlach berendezések 21
4.2. Fotonok polarizációja 23
4.3. A valószínűségi amplitúdó fogalma 26
4.4. Általánosítás kettőnél több dimenzióra 29

5. Kvantumkriptográfia, kvantumos titkosítás kétállapotú kvantumrendszerrel **30**
5.1. Klasszikus kriptográfia 30
5.2. Kvantumkriptográfia és a BB84 protokoll 31

6. EPR-paradoxon, Bell-egyenlőtlenség **34**

7. Kétréses kísérlet, hullámfüggvény **40**

8. De Broglie-hullámok, szabad részecske Schrödinger-egyenlete **43**
8.1. A de Broglie-féle hullám 44
8.2. A szabad részecske Schrödinger-egyenlete 45

9. Az egydimenziós mozgás Schrödinger-egyenlete **47**
9.1. Kvantumos kauzalitás 48
9.2. Linearitás 48
9.3. A valószínűség megmaradása, a kontinuitási egyenlet 49

10. Várható érték, szórás **50**

11. Az impulzus és a koordináta operátorának bevezetése **52**
11.1. X és P nem fölcserélhető 54
11.2. Háromdimenziós mozgás 54

12. Az energiasajátérték-egyenlet **55**

13. Végtelen potenciálgödörbe zárt részecske **56**
13.1. Az energiasajátfüggvények és sajátértékek meghatározása 57
13.2. Kifejtés a sajátfüggvények szerint 60
13.3. A sajátfüggvények paritása 60

14. Részecske háromdimenziós dobozban **63**
14.1. Speciális eset: kockába zárt részecske ($a = b = c$) 65

15. Mozgás általános egydimenziós potenciálokban **66**

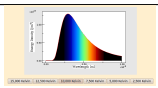
16. Véges magasságú, szimmetrikus potenciálgödörben lévő részecske **69**
16.1. Kötött állapotok 70
16.2. Szórt állapotok 74

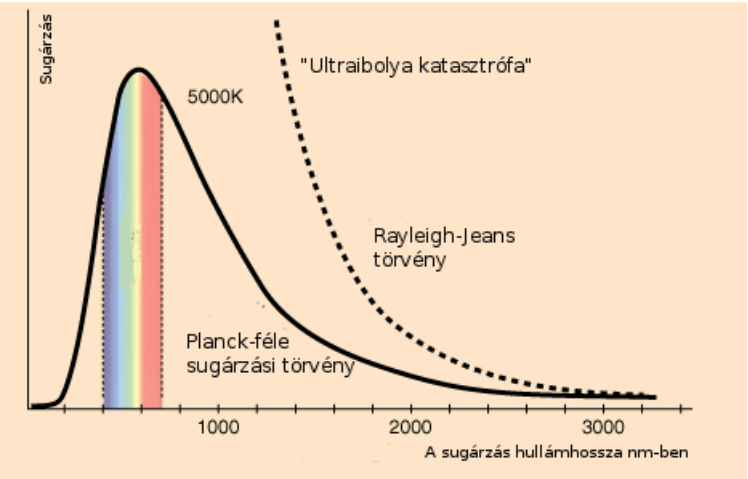
17. A kvantummechanika szabályai **79**

1. Az üregsugárzás törvényei

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

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

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



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

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

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

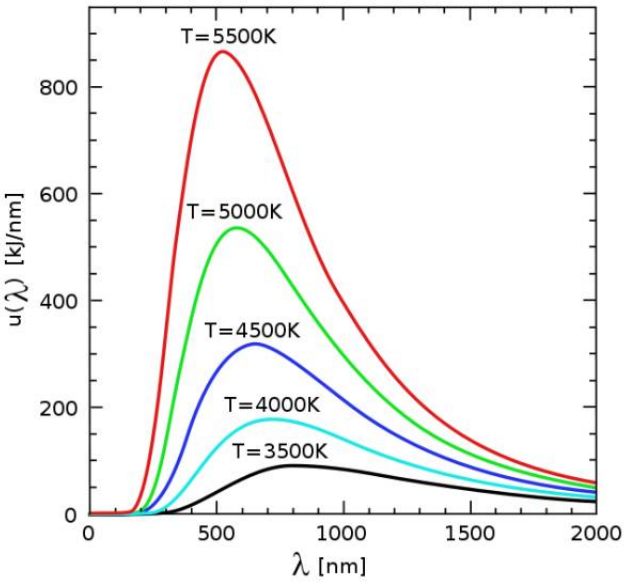
A teljes kisugárzott teljesítményt a Stefan-Boltzmann-féle törvény adja meg

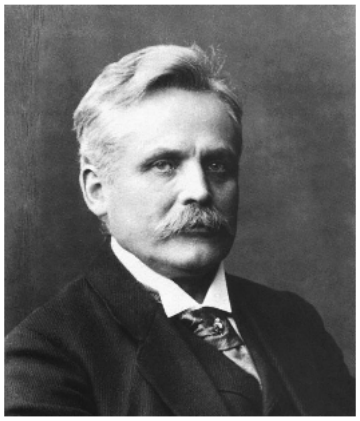
$$P = \sigma A T^4, \tag{1.2}$$

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

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

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





Wilhelm Wien (1864-1928)
Nobel díj 1911

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

1.1 Feladat: Mennyi energiát sugároz ki másodpercenként egy tízforintos érme szobahőmérsékleten (20°C-on)? A méreteit mérjük meg!
1.2 Feladat: Mekkora térfogatú levegőnek van ennyi belső energiája?

1.2. A hullámhossz szerinti eloszlás magyarázata

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

Jozef Stefan 1879
megmérte

Ludwig Boltzmann, 1884
kiszámította

4. ábra.

helyett gyakran a ν frekvenciát használjuk:

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

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

$$\lambda = \frac{c_k}{\nu}. \tag{1.4}$$

Egy további mennyiség a módus jellemzésére annak körfrekvenciája:

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi c}{\lambda} = kc. \tag{1.5}$$

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

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

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

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

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

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

$$\bar{\varepsilon} = k_B T \tag{1.7}$$

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

$$k_B = 1,38 \times 10^{-23}\ J/K. \tag{1.8}$$

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

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

Ennek az összefüggésnek a neve Rayleigh-Jeans-törvény, amely azonban a kísérletek szerint csak viszonylag alacsony frekvenciákon bizonyult helyesnek. Látható, hogy a függés adott T-nél a ν monoton (négyzetesen) növekvő függvénye, míg a kísérletek szerint ez a függvény egy ponton maximumot ér el (ennek helyét szabja meg a Wien-féle eltolódási törvény), majd megfordul és közelítőleg exponenciálisan csökkenni kezd. Ezt az ellentmondást "ultraibolya katasztrófának" szokás nevezni, mert a ν^2-el arányosan növekvő energiasűrűség elvileg is lehetetlen. A teljes energiasűrűség ugyanis az összes frekvenciára vett energiasűrűség integrálja: $\int\limits_0^\infty u_R(\nu)d\nu$, ami a ν^2- es függés miatt végtelen nagynak adódik. A Rayleigh-féle gondolatmenet tehát valahol téves.

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

$$\varepsilon = h\nu, \tag{1.10}$$

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

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

energia jut.

Ebből az üregsugárzás energiasűrűsége:

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

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

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

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

5. ábra.

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

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

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

---

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

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

jelölést. $\hbar$ értéke:

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

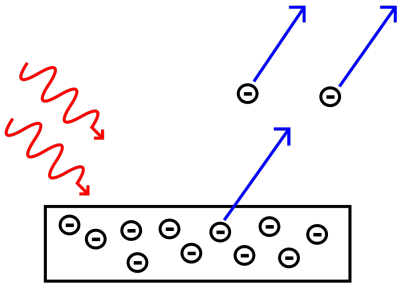
1.4 Feladat: Írjuk föl az energiasűrűséget ν helyett λ-val, azaz adjuk meg $u(\lambda)d\lambda$-t. Ez egy kissé kevésbé triviális.
1.5 Feladat: Mutassuk meg, hogy kis frekvenciákon a Planck-törvényből viszszakapjuk a Rayleigh-Jeans-törvényt. Mit jelent kvantitatíve (mennyiségileg) a "kis" frekvencia?
1.6 Feladat: Milyen törvény szerint változik közelítőleg "nagy" frekvenciákon az energiasűrűség? Ez utóbbit nevezzük Wien-féle sugárzási törvénynek, amelyet Wien még Planck előtt talált termodinamikai meggondolásokból.
1.7 Feladat: Vezessük le a Wien-féle eltolódási törvényt, az 1.4 Feladatban kapott eredményből, azaz

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

---

2. A fotonhipotézis, a fény részecske természete

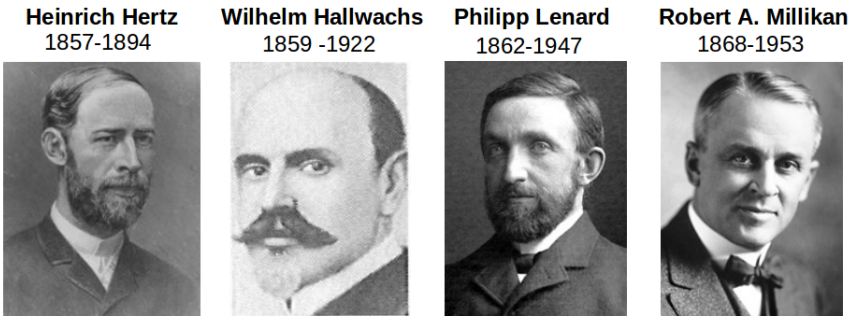
2.1. A fotoeffektus vagy fényelektromos hatás



6. ábra. A fényelektromos hatás sematikus ábrája

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

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



7. ábra.

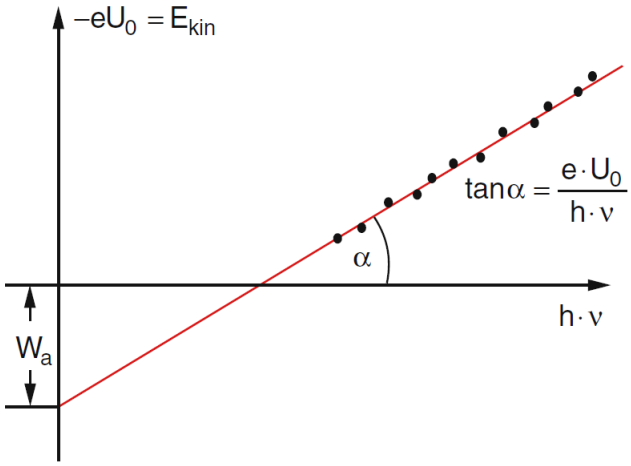
A fönti megfigyeléseket Einstein azzal magyarázta, hogy az elektronok a beérkező fényből az energiát adagokban, kvantumokban nyelik el. Egy fénykvantum energiája a Planck-féle gondolat nyomán

$$\varepsilon = h\nu, \tag{2.1}$$

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

$$\varepsilon = \hbar\omega \tag{2.2}$$

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

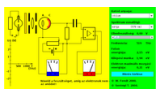


8. ábra. A fotoeffektus során kilépő elektronok mozgási energiája a fémfelületet megvilágító fény frekvenciájának függvényében. A küszöb frekvenciának megfelelő foton energia ott van, ahol az egyenes a vízszintes tengelyt metszi.

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

$$E_{kin} = h\nu - W_a \tag{2.3}$$

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

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

2.1 Feladat: A fotoeffektust egy cézium bevonatú fotocellával vizsgálva 546 nm hullámhosszúságú fény esetén az elektronok 0,33 V ellenfeszültséggel állíthatók meg, míg 365 nm hullámhosszúságú fényt használva ez az érték 1,46 V.
Mennyinek adódik a Planck-állandó értéke ezekből a mérésekből, és mennyi a cézium kilépési munkája?
Mekkora lesz az elektronok megállításához szükséges ellenfeszültség, ha a fotoeffektust 436 nm hullámhosszúságú fénnyel vizsgáljuk? Mekkora az a határhullámhossz, ameddig van elektronkilépés?
2.2 Feladat: Becsüljük meg a villanyszámla alapján, hogy mennyit fizetünk egy 5%-os hatásfokú 100W-os égő 1 másodperces bekapcsolása során egy zöld fotonért.

2.2. A foton impulzusa

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

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

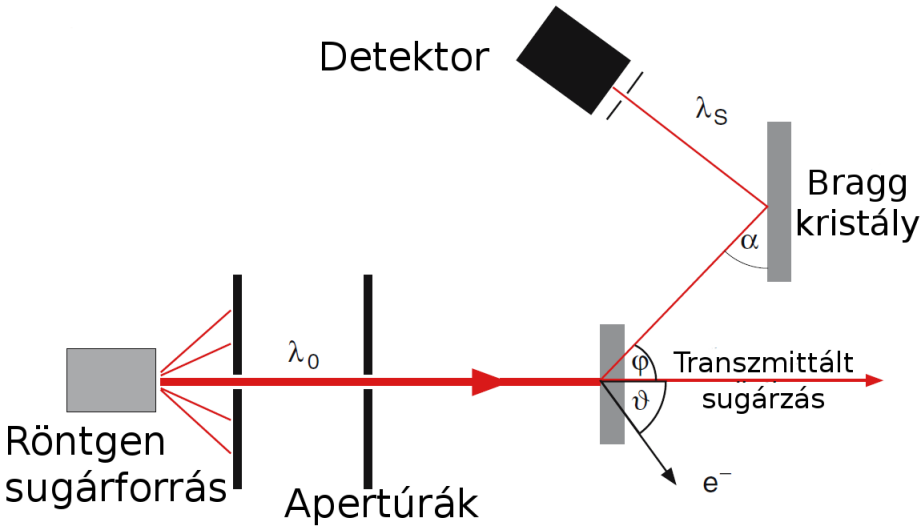
ahol $\hat{\mathbf{k}}$ a monokromatikus síkhullámnak tekintett fényhullám terjedési irányába mutató egységvektor, $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{k}}$ pedig a fény hullámszámvektorának nevezett mennyiség, melynek nagyága $k = 2\pi/\lambda$. $\mathbf{p}$ fönti alakja összhangban van a tetszőleges m_0 (nyugalmi)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

$$E^2/c^2 - p^2 = (m_0 c)^2 \tag{2.5}$$

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

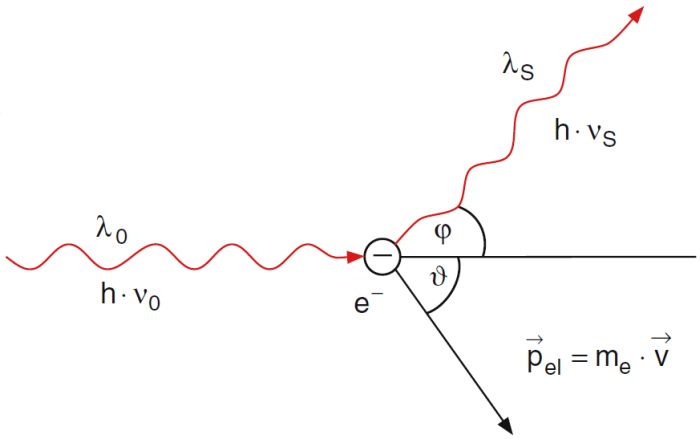
2.3. A Compton-effektus

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



9. ábra.

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



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

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

$$h\nu_0 + E_0 = h\nu_s + E_e, \tag{2.6a}$$

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

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

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

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

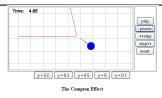
A fönti három egyenletből némi matematikával a

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

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

$$\lambda_C = \frac{h}{m_e c} = 2,43 \times 10^{-12}\mathrm{m} \tag{2.9}$$

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

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

2.3 Feladat: Vezessük le a Compton-effektus során a hullámhosszváltozásra vonatkozó formulát az elektron energiájának és impulzusának klasszikus alakjával.
2.4 Feladat: Vezessük le ugyanezt a ralativisztikus energia és impulzus képletét használva.

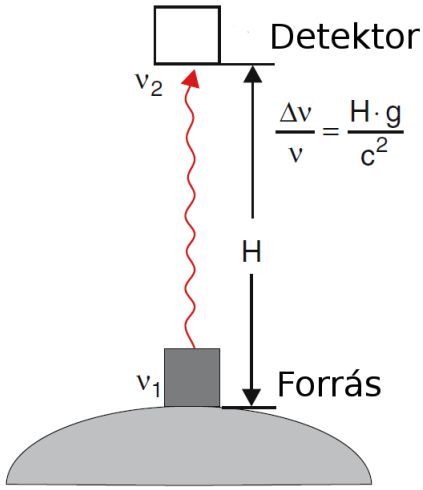
A kísérletek tehát azt mutatják, hogy az elektromágneses mező bizonyos értelemben diszkrét természetű, adott frekvenciájú és irányú terjedés esetén, a fönti formuláknak megfelelő energiával és impulzussal rendelkező részecskeként hat kölcsön az atomos anyaggal.

2.4. A gravitációs vöröseltolódás

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

$$\frac{\nu_0 - \nu_l}{\nu} = \frac{\ell g}{c^2}. \tag{2.10}$$

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



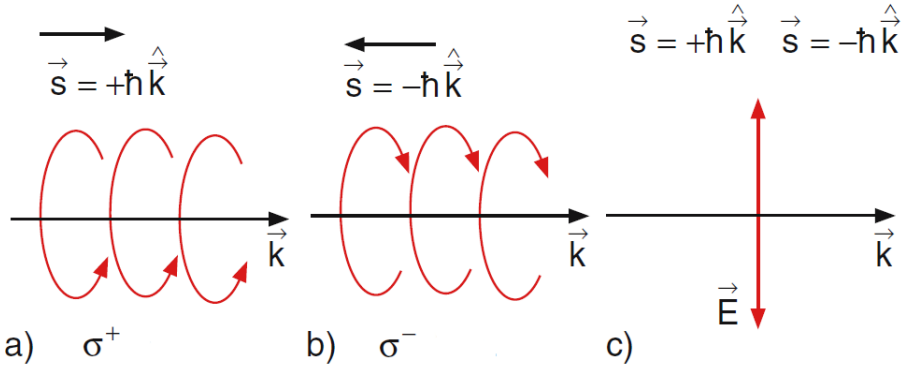
11. ábra. Kísérleti elrendezés a vöröseltolódás mérésére

2.5. A foton impulzusnyomatéka

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

$$\mathbf{S} = \pm\hbar\frac{\mathbf{k}}{k}. \tag{2.11}$$

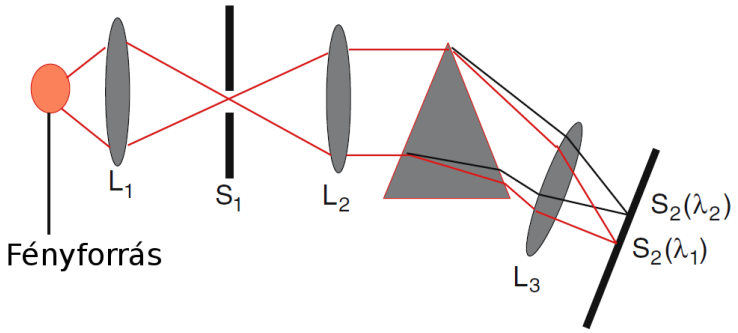
Nagysága tehát $\hbar$, és vagy a terjedés irányába, vagy azzal ellentétes irányba mutat. A + előjel esetén σ^+ állapotú, pozitív helicitású (a régebbi irodalomban balra, az újabb könyvekben jobbra cirkulárisan polarizált) fotonról beszélünk, a − előjel esetén negatív helicitású fotonról van szó.



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

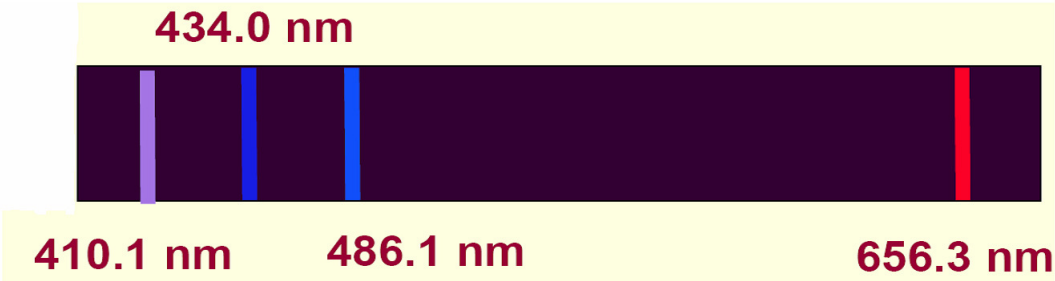
A lineárisan polarizált, (π polarizációjúnak is nevezett) fényben a foton az előző két állapot kvantummechanikai szuperpozíciójában van. Ennek az utóbbi kijelentésnek a következő fejezetekben tárgyalandó mélyebb elmélet ad majd értelmet.

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



13. ábra. Spektrográf: a különböző hullámhosszúságú komponensek

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



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

A spektrumvonalak hullámhosszára Balmer a következő képletet találta próbálgatással:

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

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

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

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

3.1 Feladat: Mutassuk meg, hogy a Balmer-képlet a Ryderg-félének speciális esete, és számítsuk ki B-t az R_H segítségével.
3.2 Feladat: A fönti 14. ábrán látható a vörös – úgynevezett H_α – Balmer vonal hullámhossza. Ennek alapján számítsuk ki az első, legnagyobb hullámhosszú ún. Lyman$-\alpha$ vonal hullámhosszát a Rydberg-állandó fölhasználása nélkül. A Lyman-sorozat az alapállapotnak nevezett legmélyebb energiájú állapotba való átmenetek során keletkezik.
3.3 Feladat: A spektroszkópusok észrevették, hogy a Balmer-sorozat további vonalai egyre sűrűbben követik egymást. Milyen hullámhosszhoz tartanak (torlódási pont) a Balmer-sorozat vonalai?

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

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

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

3.1. A Bohr-féle posztulátumok

A fönt jelzett problémák kiküszöbölésére Bohr két posztulátumot fogalmazott meg.

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

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

$$h\nu = E_2 - E_1 \tag{3.3}$$

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

$$h\nu = E_1 - E_2 \tag{3.4}$$

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

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

3.2. A hidrogénatom Bohr-féle modellje

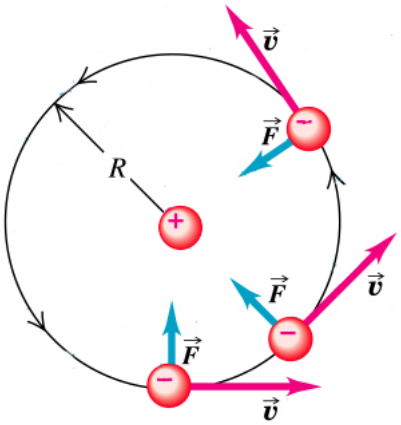
Kérdés azonban, hogy mi az a törvényszerűség, ami egy atom esetén kitünteti az 1. posztulátumban szereplő stacionárius állapotokat vagy a pályákat? Erre vonatkozóan a hidrogénatom esetén Bohrnak sikerült egy olyan kvantumföltételt megfogalmazni, amelyik helyesen adta vissza a H-atom spektrumát, ezt nevezzük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

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

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

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

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



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

Vezessük be az alábbi jelölést:

$$kq_0^2 = e_0^2, \tag{3.7}$$

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

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

Az elektron potenciális energiája a magtól r távolságra

$$E_{pot} = -\frac{e_0^2}{r}, \tag{3.9}$$

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

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

A teljes energia így:

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

Adjuk meg az elektron perdületét, másnéven impulzusnyomatékát is:

$$\tilde{\ell} := \mathbf{r} \times m_e \mathbf{v}. \tag{3.12}$$

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

$$|\tilde{\ell}| = \ell = m_e r v = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar, \qquad n = 1, 2, 3 \ldots . \tag{3.13}$$

Ebből kiszámítható, hogy a teljes energia

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

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

Látható, hogy a pályasugarak diszkrétek, és a

$$\frac{\hbar^2}{m_e e_0^2} = a_0 = 0,53 \times 10^{-10}\,\mathrm{m} \tag{3.16}$$

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

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

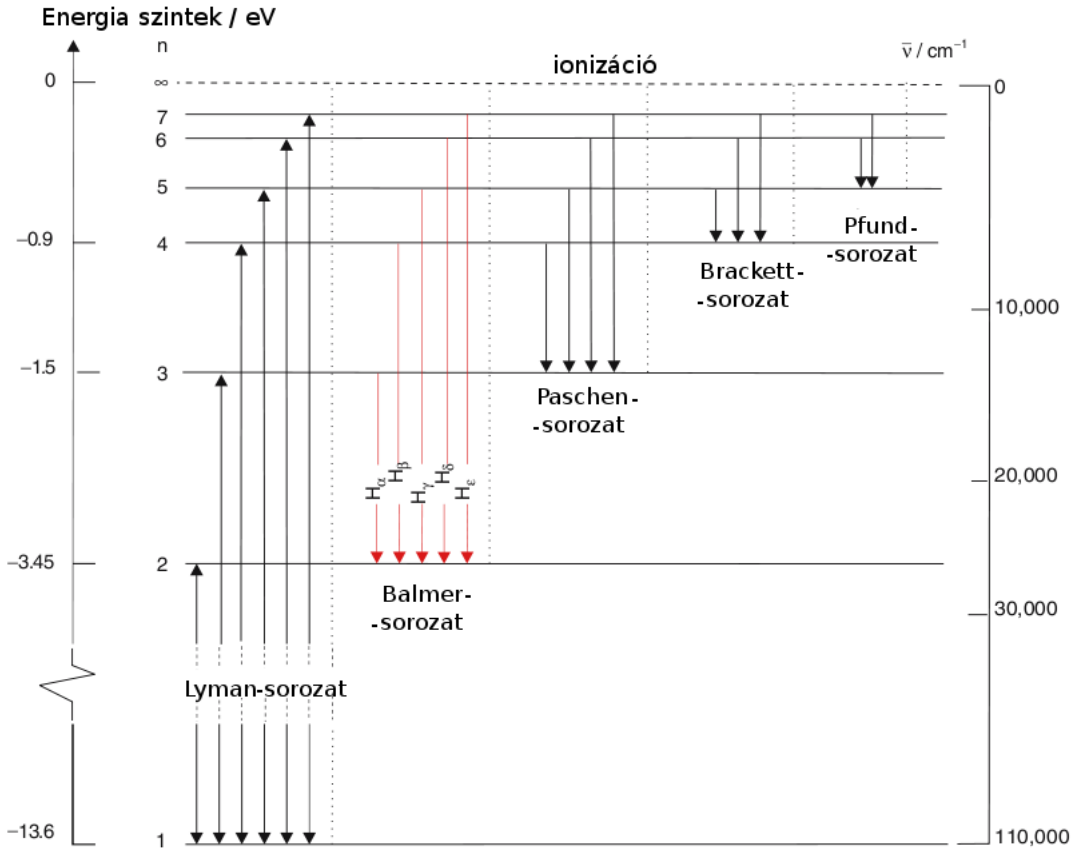
ahol a Rydberg

$$1\,\mathrm{Ry} = 2,18 \times 10^{-18}\,\mathrm{J} = 2,2\ a\,\mathrm{J} = 13,6\,\mathrm{eV} \tag{3.18}$$

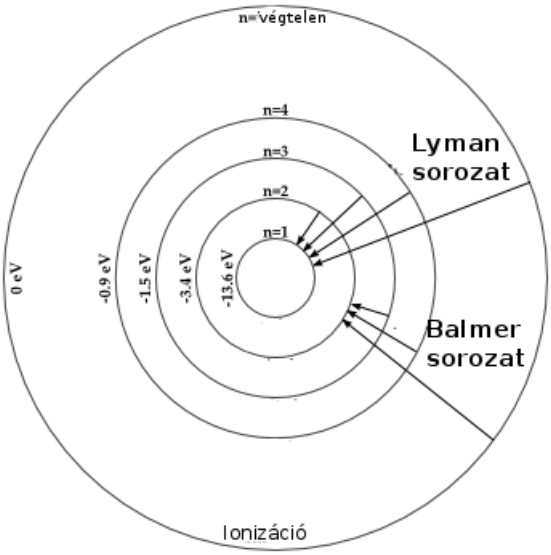
az atomfizikában gyakran használt energiaegység. A Bohr-féle 2. posztulátummal kiegészítve így a H-atom által kisugárzott, vagy elnyelt fény (elektromágneses hullám) frekvenciájára a

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

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



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

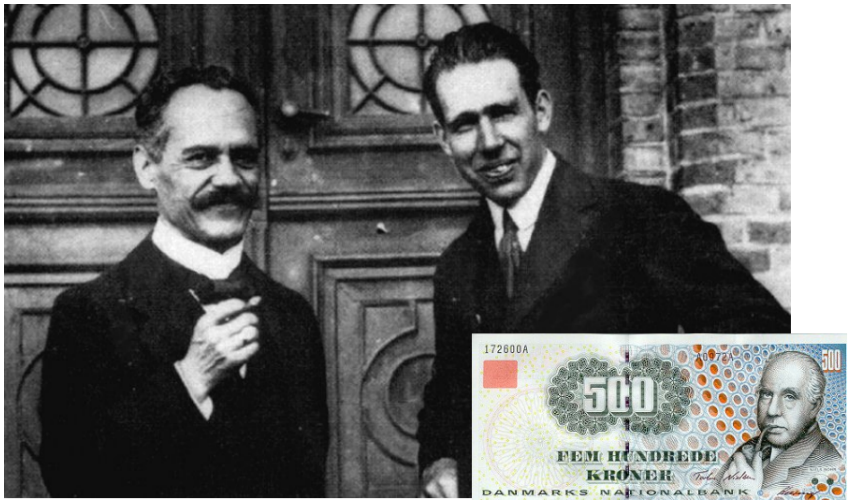


17. ábra. A lehetséges átmenetek a Lyman- és a Balmer-sorozat esetén

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

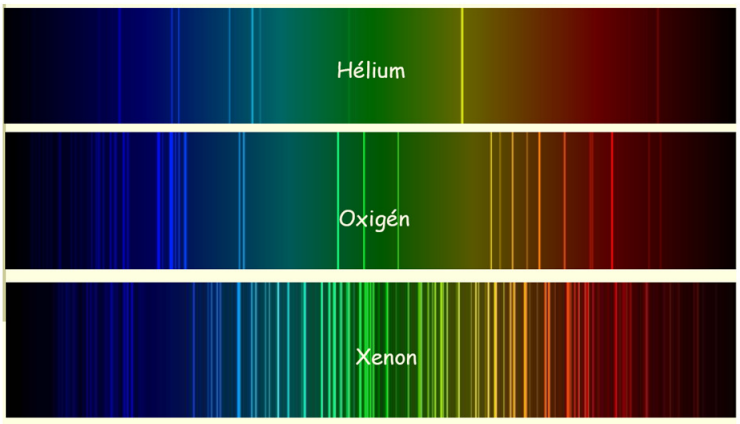
3.4 Feladat: Milyen hibák láthatók a fönt idézett animáción?
3.5 Feladat: Számítsuk ki az elektron sebességét a Bohr-modell szerint az n-edik körpályán.
3.6 Feladat: A H-atom Bohr-modelljében szereplő tömeg valójában az elektron és a mag redukált tömege.
Mekkora ennek alapján a Lyman-α vonal hullámhosszának különbsége a deutérium (nehézhidrogén) és a hidrogén esetén? (Nézzünk utána, hogy mi a redukált tömeg, és mi a nehézhidrogén.)

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



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

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



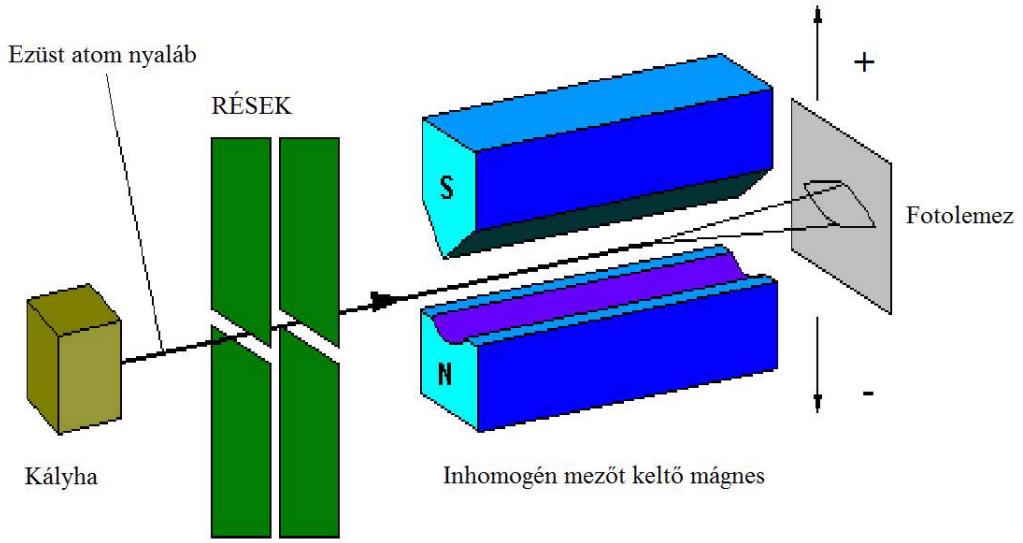
19. ábra. A He- az O- és a Xe-atom emissziós spektruma

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

4. Feles spin és fotonpolarizáció

4.1. Stern-Gerlach berendezések

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



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

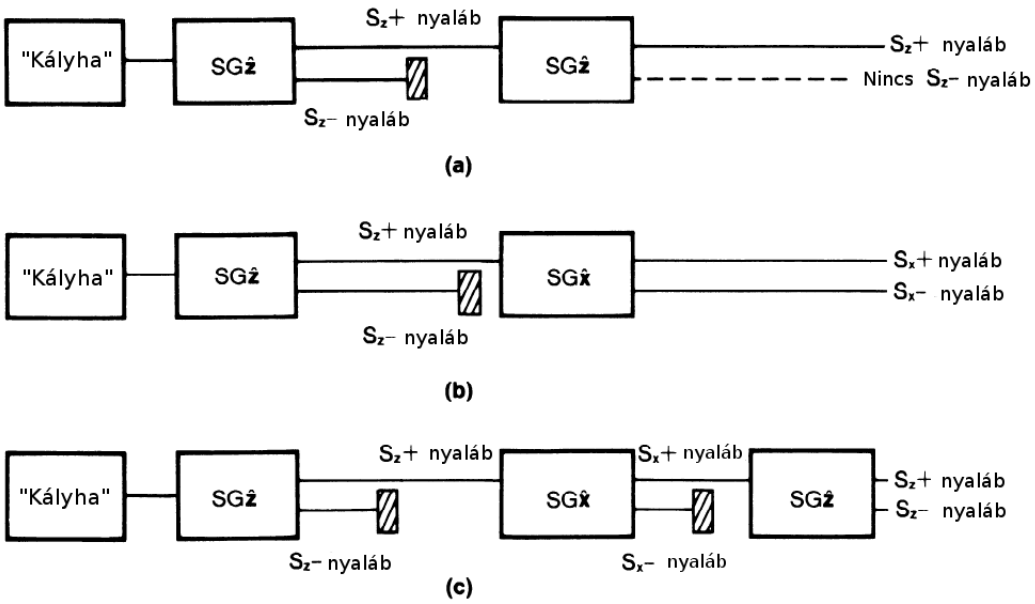
Azt gondolhatjuk, hogy a mágnesbe érkező atomok mágneses momentum vektorának az iránya akármilyen irányú is lehet a térben, s ennek megfelelően az egyes atomok mágneses momentumainak z komponensei tetszőleges nagyságúak lehetnek, tehát azt várjuk, hogy az ezüstatomok eltérülési iránya egy folytonos eloszlást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

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

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{S}, \tag{4.1}$$

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

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



21. ábra. Stern-Gerlach berendezések egymás után

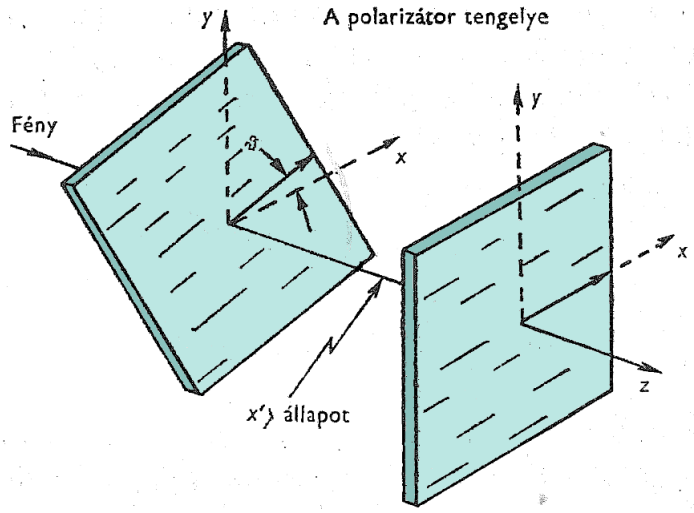
Takarjuk ki most az egyik kimenő nyalábot, mondjuk a $-z$ irányba eltérülőt, és helyezzünk el egy másik Stern-Gerlach berendezést az első után, amelynek az inhomogén tere ugyanolyan, (azaz z irányú) mint az elsőé. Ekkor ennek $-z$-nek megfelelő kimenetén már nem jelentkeznek részecskék, ami érthetőnek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

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

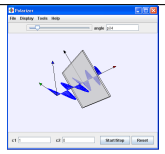
22. ábra.

4.2. Fotonok polarizációja

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



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

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

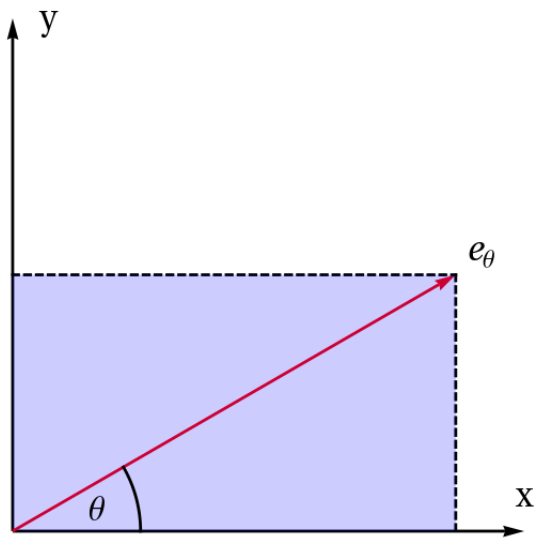
Hogyan magyarázhatjuk a jelenséget fény esetén? A lézerből kijövő fényhullám transzverzális, és elektromos vektora $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cos(\omega t - kz)$. Itt $\mathbf{E}_0$ iránya véletlenszerű, ezért átengedjük először egy x irányú polarizátoron, amely kiválasztja az x irányú rezgést. Ennek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

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

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

$$\hat{e}_\theta = \hat{x}\cos\theta + \hat{y}\sin\theta \tag{4.2}$$

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



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

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

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

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

$$\frac{N_x}{N} = \cos^2\theta, \qquad \frac{N_y}{N} = \sin^2\theta. \tag{4.4}$$

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

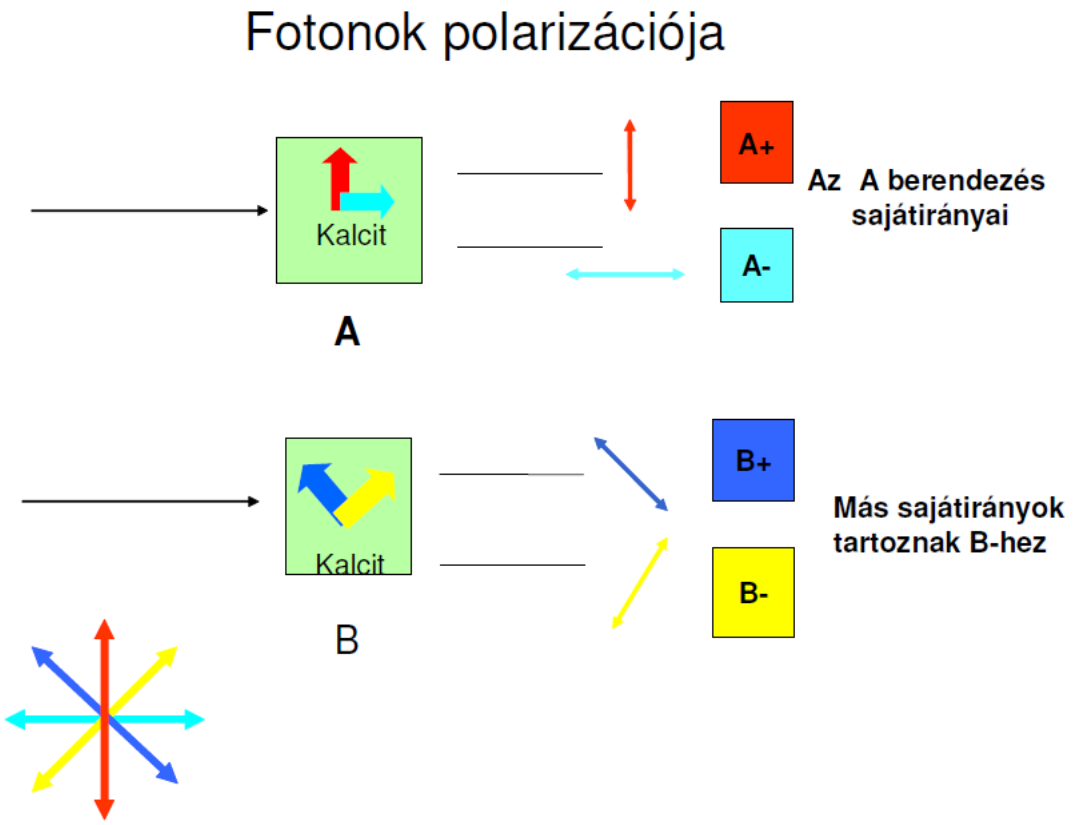
Egy berendezés sajátállapotait szokás bázisállapotoknak nevezni, mert ezek segítségével a többi állapot a (4.2) összefüggéshez hasonlóan kifejthető. Ebben az értelemben pl. az A bázisállapotai $\hat{x}$ és $\hat{y}$, míg a hozzá képest 45°-kal elfordított B berendezés sajátállapotait, azaz bázisállapotait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

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

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

Ennek alapján

$$\hat{e}_\theta = \hat{x}\cos\theta + \hat{y}\sin\theta = \hat{x}\,\langle \hat{x}|\hat{e}_\theta\rangle + \hat{y}\,\langle \hat{y}|\hat{e}_\theta\rangle \tag{4.6}$$



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

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

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

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

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

4.3. A valószínűségi amplitúdó fogalma

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

$$\hat{e}_\theta = \hat{x}\cos\theta + \hat{y}\sin\theta \tag{4.8}$$

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

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

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

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

$$\langle \hat{e}'|\hat{e}_\theta\rangle = 0 \tag{4.10}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

A negatív helicitású fotonokra ugyanez az eredmény:

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

4.2 Feladat: Bontsuk föl az $\hat{e}_\theta$ irányú lineárisan poláros fotont egy $\hat{x}$ és $\hat{y}$ irányban lineárisan polárosra, majd engedjük át egy + -os szűrőn, úgy, hogy közben nem vizsgáljuk, hogy $\hat{x}$ vagy $\hat{y}$ irányú volt a foton. A $\langle +|\hat{e}_\theta\rangle$ valószínűségi amplitúdó így két rész interferenciájából származik: $\langle +|\hat{e}_\theta\rangle = \langle +|\hat{x}\rangle \langle \hat{x}|\hat{e}_\theta\rangle + \langle +|\hat{y}\rangle \langle \hat{y}|\hat{e}_\theta\rangle$. A tapasztalat szerint $|\langle +|\hat{e}_\theta\rangle|^2 = \frac{1}{2}$, a θ szögtől függetlenül. Mutassuk meg, hogy nem lehet egyszerre $\langle +|\hat{x}\rangle$ és $\langle +|\hat{y}\rangle$ is valós, azaz nem lehet $\pm 1/\sqrt{2}$. Mutassuk meg, hogy a fönti komplex amplitúdók viszont tetszőleges θ esetén helyes eredményt adnak.

4.3 Feladat: Mutassuk ki hasonló okoskodással ugyanezt a $\langle -|\hat{e}_\theta\rangle$ amplitúdókra.
4.4 Feladat: Tudjuk, hogy $\langle \hat{e}_\theta|\hat{e}_{\theta'}\rangle = \cos(\theta - \theta')$, (honnan tudjuk?). Engedjük a bejövő nyalábot közben át egy $\pm$ berendezésen, azaz vizsgáljuk az amplitúdót a következő fölbontásban: $\langle \hat{e}_\theta|\hat{e}_{\theta'}\rangle = \langle \hat{e}_\theta|+\rangle\langle +|\hat{e}_{\theta'}\rangle + \langle \hat{e}_\theta|-\rangle\langle -|\hat{e}_{\theta'}\rangle$. Mutassuk meg, hogy szükségképpen $\langle \hat{e}_\theta|+\rangle = \langle +|\hat{e}_\theta\rangle^* = e^{i\theta}$, és $\langle \hat{e}_\theta|-\rangle = \langle -|\hat{e}_\theta\rangle^* = e^{-i\theta}$, azaz az amplitúdót fordított sorrendben számítva, az az eredeti amplitúdó komplex konjugáltjaként adódik.
4.5 Feladat: Mutassuk meg, egy xy berendezés közbeiktatásával és az amplitúdók interferenciájával, hogy a fönti választás esetén, a tapasztalattal összhangban $\langle +|-\rangle = 0$.

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

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

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

4.6 Feladat: Tekintsünk egy függőlegesen polarizált fénynyalábot, amely egymás után áthalad a következő berendezéseken:
(a) polarizátor (Nicol-prizma), mely csak a függőlegesen polarizált fényt engedi át.
(b) polarizátor (Nicol-prizma), mely csak a függőlegessel +45°-ot bezáró síkban polarizált fényt engedi át.
(c) polarizátor (Nicol-prizma), mely csak a vízszintesen polarizált fényt engedi át.
(d) Mágneses térbe helyezett speciális anyag, ami +45°-al elforgatja a polarizációs síkot (Faraday-effektus).
(e) $\lambda/4$-es lemez, ami $\frac{\pi}{2}$ relatív fáziskülönbséget hoz létre a vízszintesen és függőlegesen polarizált komponensek között.
(f) polarizátor (Nicol-prizma), mely csak a függőlegessel −45°-ot bezáró síkban polarizált fényt engedi át.

4.6.1 Feladat: Legyen a beeső fényhullám amplitúdója E. Milyen polarizációjú és mekkora amplitúdójú fény hagyja el az a, b, c, d, e és f eszközöket?
4.6.2 Feladat: Egyetlen függőlegesen polarizált foton lép be a rendszerbe. Mi figyelhető meg az a, b, c, d, e és f eszközök után?
(Mekkora valószínűséggel jut el oda a foton és milyen lesz a polarizációja)?
4.6.3 Feladat: A fény állapota jellemezhető egy vektorral. Az E amplitúdójú függőleges polarizációjú fény pl. a $\phi = \begin{pmatrix} 0 \\ E \end{pmatrix}$ vektorral írható le. Egy berendezésen áthaladva a fényt leíró vektor megváltozik. Ezt a változást egy mátrixszal lehet leírni. Pl. az (a) berendezéshez tartozó mátrix: $A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$. Írjuk fel a többi berendezésekhez tartozó mátrixokat (B, C, D, E, F)! Adjuk meg hogyan transzformálódik az imént megadott vektor, amint sorban halad végig az eszközökön!
4.6.4 Feladat: Az előző pontban olyan koordinátarendszert választottunk, amelynek x tengelye vízszintes, y tengelye függőleges volt. Válasszunk most egy ehhez képest $45°$-kal elforgatott koordinátarendszert, amiben a $\begin{pmatrix} 0 \\ E \end{pmatrix}$ vektor $-45°$-ban polarizált fényt ír le. Írjuk fel a függőlegesen polarizált fényt jellemző vektort ebben a koordinátarendszerben! Írjuk fel a berendezéseket leíró transzformációs mátrixokat (A', B', C', D', E', F') és az egyes berendezéseken való áthaladás utáni állapotvektorokat is az elforgatott bázisban és végezzük el az állapotvektorok transzformációját!
4.6.5 Feladat: Határozzuk meg a transzformációs mátrixok sajátértékeit és sajátvektorait!
4.6.6 Feladat: Az eredeti és az elforgatott koordinátarendszerben felírt állapotvektorok és mátrixok egymásba transzformálhatók. Hogyan?

4.4. Általánosítás kettőnél több dimenzióra

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

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

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

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

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

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

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

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

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

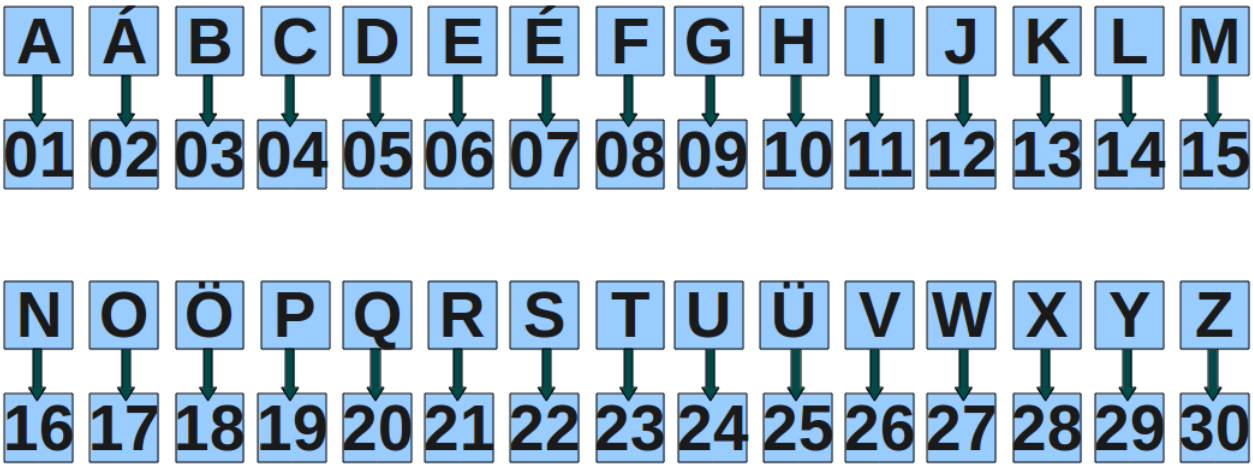
$$\sum_{i=1}^{n} \langle u_k|v_i\rangle \langle v_i|\psi\rangle \tag{4.19}$$

összeggel kell kiszámítani.

5. Kvantumkriptográfia, kvantumos titkosítás kétállapotú kvantumrendszerrel

5.1. Klasszikus kriptográfia

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



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

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

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

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

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

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

címen.

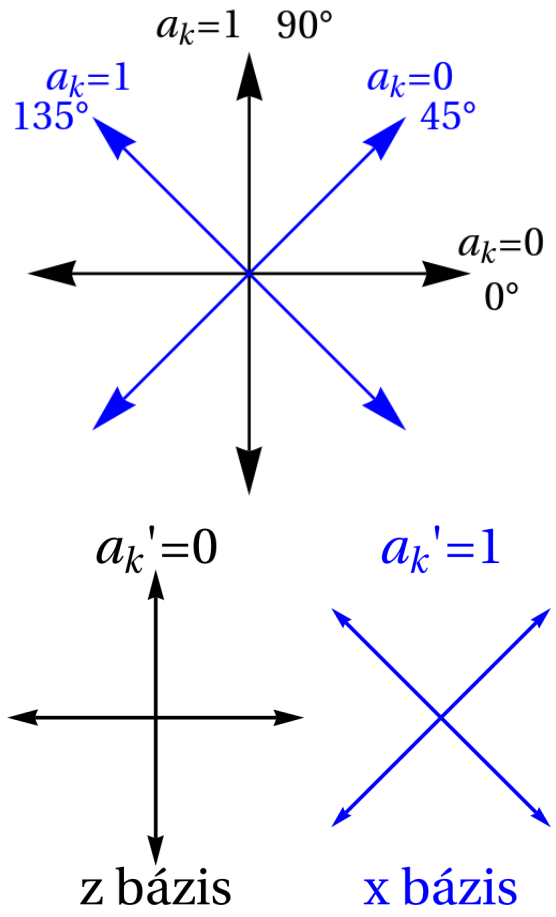
Megjegyezzük még, hogy a gyakorlatban mind a kódolandó szöveget, mind a kulcsot megfelelő hosszúságú bináris (0 és 1 számokból álló) karakterek sorozatával szokás megadni.

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

5.2. Kvantumkriptográfia és a BB84 protokoll

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

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



27. ábra. Alíz a fönti beállításokat használja

A két bázist a következőképpen választjuk. Az egyiket, melyet Z bázisnak nevezünk, a $|\leftrightarrow\rangle$ és $|\updownarrow\rangle$ állapotok, azaz a horizontálisan (vízszintesen), illetve vertikálisan (függőlegesen) polarizált fotonállapotok alkotják. Ezekre a korábbiak szerint érvényesek a következők, $\langle\leftrightarrow|\updownarrow\rangle = 0$, $\langle\leftrightarrow|\leftrightarrow\rangle = \langle\updownarrow|\updownarrow\rangle = 1$.
A másik bázis elemei, amelyet X bázisnak nevezünk, a $+45°$-ban, és $-45°$-ban polarizált fotonállapotok, melyeket $|\nearrow\rangle$ és $|\nwarrow\rangle$ módon jelölünk. Ez a bázis szintén ortonormált. A két bázis között a következő kapcsolat áll fenn: $|\nearrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\leftrightarrow\rangle + |\updownarrow\rangle)$, illetve $|\nwarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\updownarrow\rangle - |\leftrightarrow\rangle)$.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

6. EPR-paradoxon, Bell-egyenlőtlenség

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

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

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

Egzakt definíciót igyekeznek adni a teljes elméletről:

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

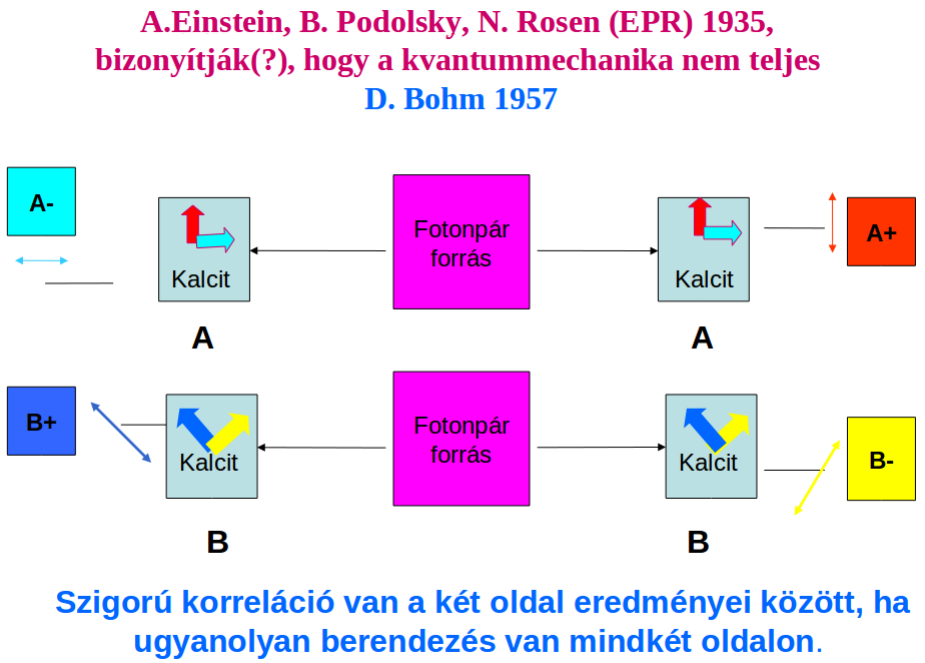
De mi a valóság egy eleme? Erre is választ kapunk.

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

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

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

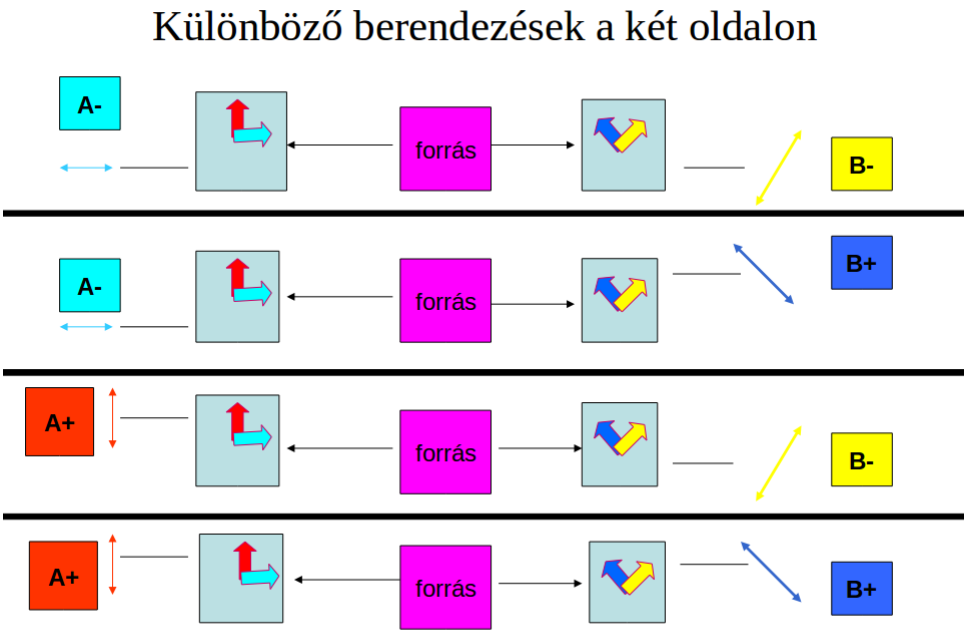
pár tulajdonságai között szigorú (anti)korreláció van, ami a következőt jelenti. Ha mindkét fotont ugyanolyan polarizációs beállítású mérőberendezésen engedjük át, pl. vízszintes-függőleges, A jelű berendezésen, akkor ha az egyik foton vízszintesen polarizált, akkor a párja függőlegesen, vagy fordítva.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



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

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

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

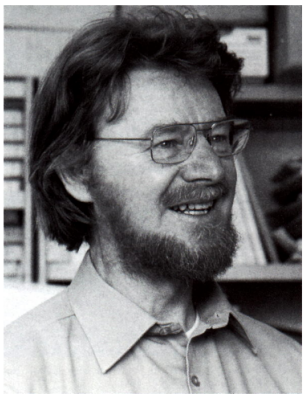


29. ábra.

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

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

John S. Bell (1928-1990)



30. ábra.

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

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

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

$$N(A+, C+) \leq N(A+, B+) + N(B+, C+). \tag{6.1}$$

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

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

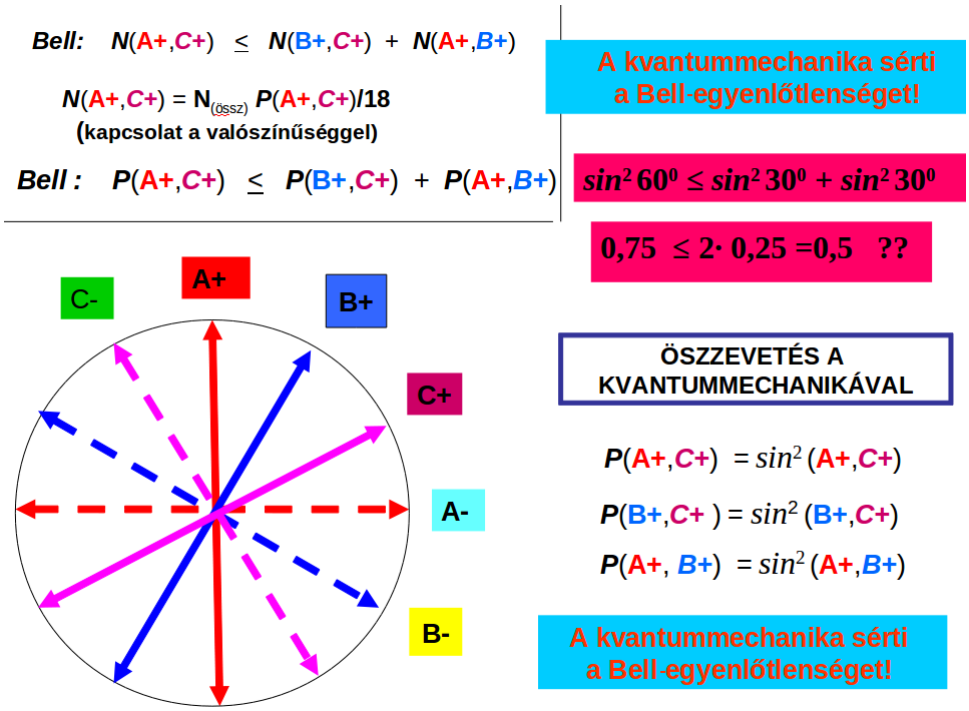
$$P(A+, C+) = \frac{N(A+, C+)}{\sum_{i=1}^{8} N_i}$$

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

$$P(A+,C+) \leq P(A+,B+) + P(B+,C+) \tag{6.2}$$

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

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



31. ábra. A Bell-egyenlőtlenség sérülése

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

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

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

$$\frac{3}{4} \leq \frac{1}{2} \tag{6.4}$$

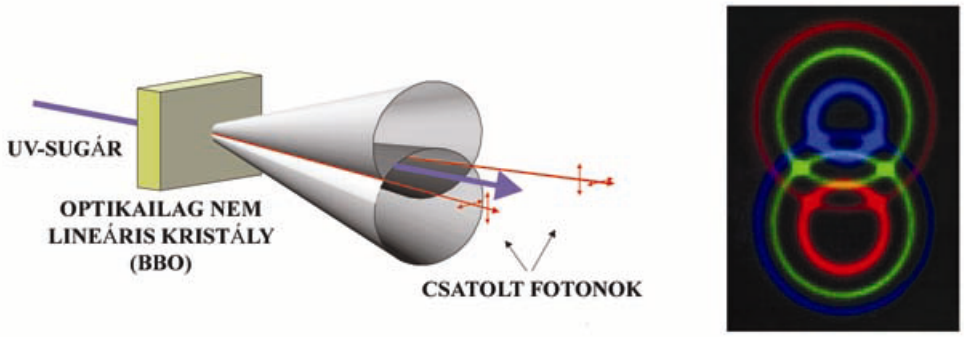
eredménynek, ami nyilvánvalóan hamis.

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

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

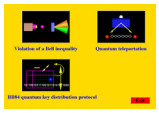
A Bell-egyenlőtlenség teljesülésére, illetve sérülésére vonatkozó első kísérletet J. F. Clauser és munkatársai végezték 1972-ben. Egy későbbi A. Aspect nevéhez fűződő (1982) kísérlet volt az első, ahol a fotonpár keletkezését követően a mérőberendezések (kristályok) beállítását a különböző lehetséges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

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



32. ábra. Összefonódott fotonpár keltése

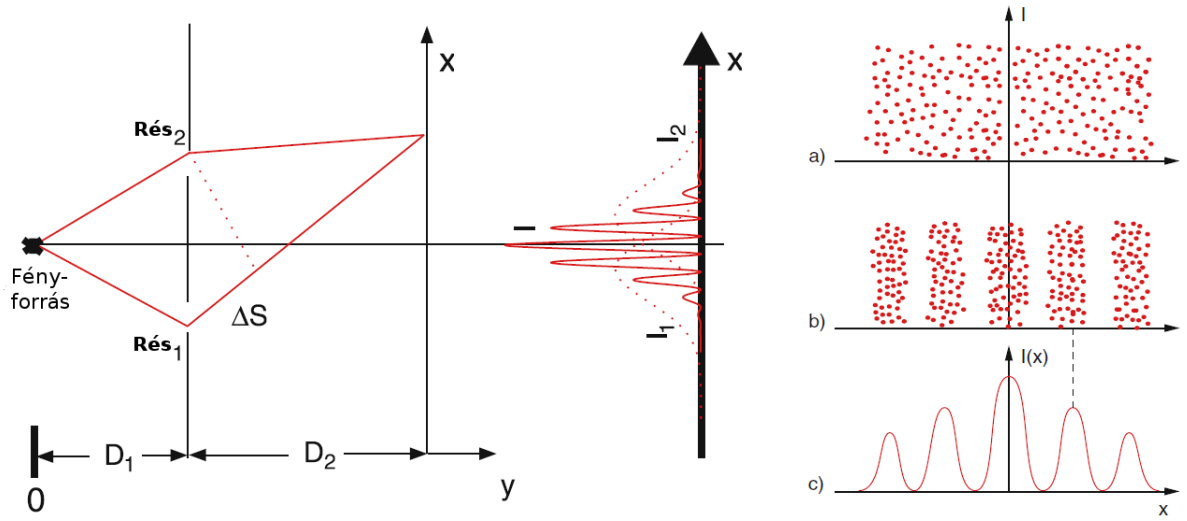
A 351 nm-es ultraibolya lézerfény fotonjait a nemlineáris kristály két kisebb energiájú fotonra hasítja. Ezt a folyamatot a nemlineáris optikában parametrikus lekonvertálásnak nevezik. Az így keletkező fénysugarak két egymást metsző kúp palástja mentén távoznak a kristályból, a fotonokra vonatkozó energia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

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

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

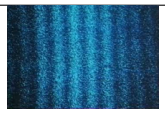
7. Kétréses kísérlet, hullámfüggvény

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

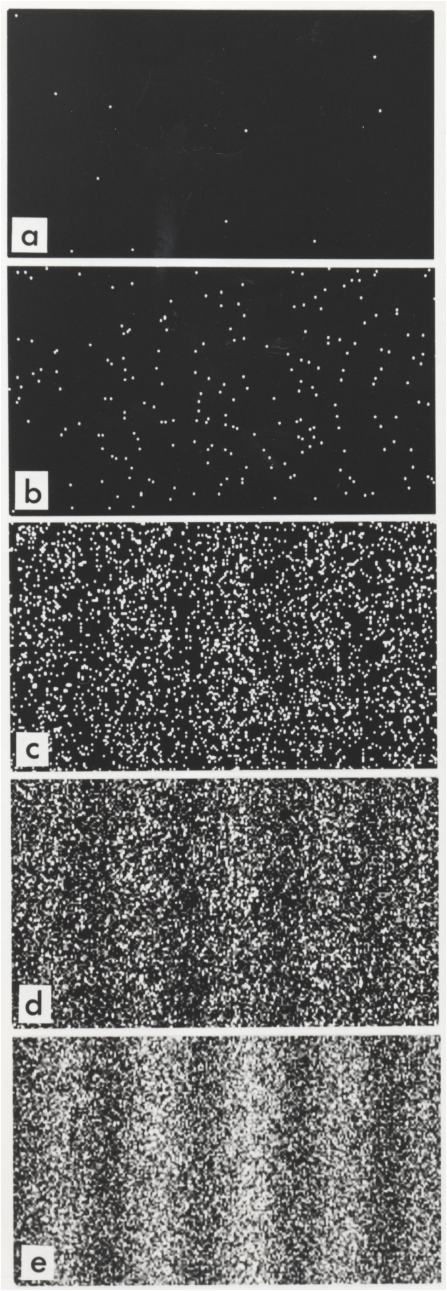


33. ábra. Young-féle kétréses kísérlet

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

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

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



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

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

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x), \tag{7.1}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

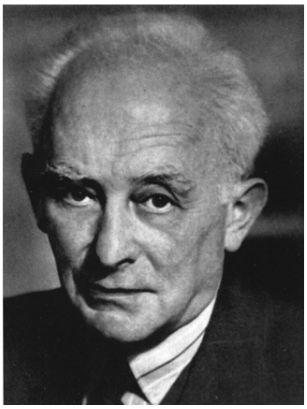
Nem hangsúlyoztuk eddig, de a hullámfüggvény általában az időtől is függ, ilyenkor a jelölésére egy nagy görög betűt fogunk használni: $\Psi(x,t)$. Milyen lehet egy konkrét esetben ez a függvény? Ez függ a kérdéses fizikai szituációtól, általában csak annyi van előírva, hogy legyen négyzetesen integrálható,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

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

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

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

Max Born (1882-1970)



35. ábra.

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

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

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

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

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

$$\langle x|\psi\rangle = \sum_k c_k \langle x|\varphi_k\rangle\,, \tag{8.1}$$

azaz a

$$\psi(x) = \sum_k c_k \varphi_k(x) \tag{8.2}$$

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

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

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

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

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

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

$$c_j = \int \varphi_j^*(x)\psi(x)dx \tag{8.5}$$

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

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

8.1. A de Broglie-féle hullám

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

Louis de Broglie (1892 – 1987)

36. ábra.

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

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

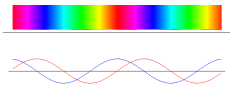
ahol C egy állandó, amelyet $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$- nak választunk. E választás okát az alábbiakban látjuk majd. A p index arra utal, hogy ez a függvény konkrétan egy határozott p impulzusú részecskét ír le. Mivel egy erőmentes, m tömegű nemrelativisztikus részecske esetén $\varepsilon = p^2/2m$,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

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

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

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

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

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

8.2. A szabad részecske Schrödinger-egyenlete

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

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

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

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

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

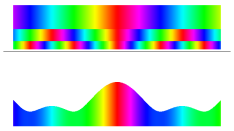
$$-i\hbar\frac{\partial\Psi_p}{\partial x} = p\Psi_p \tag{8.10}$$

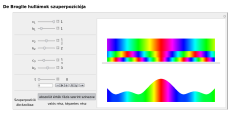
azaz a Ψ_p deriváltjának $-i\hbar$-szorosa a Ψ_p-nek éppen a p-szerese. A de Broglie-hullám alakja adott – mondjuk $t = 0$ – időpontban $v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ikx}$.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Lássuk ennek igazolását:

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

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

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

8.1 Feladat: Tekintsük a $\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}}e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}+i\frac{p_0}{\hbar}x}$ Gauss-típusú hullámfüggvényt.
a) Ellenőrizzük, hogy $\psi_0(x)$ valóban normált.
b) Számítsuk ki a $\tilde{\psi}_0(p)$ függvényt.

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

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

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

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

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

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

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

9. Az egydimenziós mozgás Schrödinger-egyenlete

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

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

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

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

37. ábra.

9.1. Kvantumos kauzalitás

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

9.2. Linearitás

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

$$\Psi(x, t) = c_1\Psi_1(x, t) + c_2\Psi_2(x, t) \tag{9.2}$$

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

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

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

9.3. A valószínűség megmaradása, a kontinuitási egyenlet

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

$$|\Psi(x,t)|^2 = \rho(x,t) \tag{9.3}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

A jobb oldalon szereplő

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

mennyiség neve valószínűségi áram (fluxus), s így egy

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0 \tag{9.9}$$

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

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

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

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

azaz ha kezdetben

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

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

10. Várható érték, szórás

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

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

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

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

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

$$\frac{N_k}{N} \to \mathcal{P}(\alpha_k). \tag{10.2}$$

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

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

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

$$\langle A\rangle_\psi = \sum_k |\langle u_k|\psi\rangle|^2\alpha_k = \sum_k \langle\psi|u_k\rangle\,\alpha_k\langle u_k|\psi\rangle = \tag{10.4}$$

$$= \sum_k \alpha_k|c_k|^2 = \sum_k c_k^*\alpha_k c_k. \tag{10.5}$$

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

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

definícióval.

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

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

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

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

vagy kihasználva a várható érték (10.3) definícióját:

$$(\Delta A)^2_\psi = \left\langle (A - \langle A\rangle_\psi)^2 \right\rangle_\psi = \left\langle A^2 \right\rangle_\psi - \langle A\rangle^2_\psi . \tag{10.9}$$

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

$$(\Delta A)_\psi = \sqrt{\left\langle (A - \langle A\rangle_\psi)^2 \right\rangle_\psi} = \sqrt{\langle A^2\rangle_\psi - \langle A\rangle^2_\psi}. \tag{10.10}$$

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

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

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

$$\langle X\rangle := \int x\rho(x)dx \tag{10.11}$$

integrálhoz tart, ez a koordinátamérés várható értéke.

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

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

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

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

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

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

formulával számíthatjuk ki. A koordináta szórásnégyzetét pedig a

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

képlet adja.

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

11. Az impulzus és a koordináta operátorának bevezetése

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

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

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

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

emiatt

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

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

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

tehát

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

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

$$\hat{P} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{11.7}$$

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

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

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

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

$$\langle P \rangle = m\frac{d}{dt}\langle X \rangle \tag{11.10}$$

egyenlet. Itt

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

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

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

Az integrandust itt a

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

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

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

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

Az impulzus négyzetének várható értéke így a

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

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

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

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

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

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

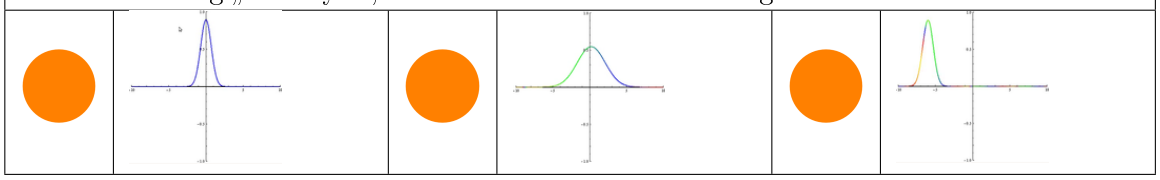
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \tag{11.18}$$

illetve a Schrödinger-egyenlet:

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

11.1 Feladat: Tekintsük a $\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + i\frac{p_0}{\hbar}x}$ Gauss-típusú hullámfüggvényt.
a) Mutassuk meg, hogy $\langle X \rangle = x_0$ és $\langle P \rangle = p_0$.
b) Számítsuk ki X és P szórását ebben az állapotban.

GAUSS-CSOMAG SZÉTFOLYÁSA
Az alábbi három animáción egy-egy Gauss-csomag időfejlődését láthatjuk. A három esetben az impulzus várható értéke különböző, láthatunk egy „álló”, egy „lassú” és egy „gyors” hullámcsomagot. Az idő előrehaladtával mindhárom esetben megfigyelhető, hogy a hullámcsomag „szétfolyik”, azaz a koordináta szórása megnő.



11.1. X és P nem fölcserélhető

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

$$\hat{X}\hat{P}\Psi(x,t) - \hat{P}\hat{X}\Psi(x,t) = -i\hbar x\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t) + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left[x\Psi(x,t)\right] = \\ = i\hbar\Psi(x,t), \tag{11.20}$$

vagy másképpen

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

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

Vezessük be az

$$\hat{X}\hat{P} - \hat{X}\hat{P} = [\hat{X}, \hat{P}] \tag{11.22}$$

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

$$[X, P] = i\hbar, \tag{11.23}$$

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

11.2. Háromdimenziós mozgás

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

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

A helykoordináta operátorát az

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

az impulzusét a

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

összefüggés definiálja.

Az állapot időfüggését az

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

Schrödinger-egyenlet adja meg.

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

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

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

Fourier-transzformációs képletek kapcsolnak össze.

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

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

12. Az energiasajátérték-egyenlet

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

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

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

$$\Psi(x,t) = \tau(t)u(x). \tag{12.2}$$

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

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

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

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

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

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

Ennek megoldása

$$\tau(t) = Ce^{-i\varepsilon t/\hbar}, \tag{12.6}$$

ahol C egy állandó.

A másik egyenlet

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

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

$$Hu(x) = \varepsilon u(x). \tag{12.8}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

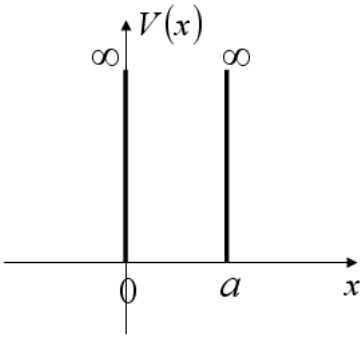
12.1 Feladat: Mutassuk meg, hogy két különböző ε-hoz tartozó $\psi_\varepsilon(x,t)$ stacionárius hullámfüggvény lineáris kombinációjához tartozó valószínűségi sűrűségfüggvény függ az időtől. Milyen ennek az időfüggésnek a jellege?

---

13. Végtelen potenciálgödörbe zárt részecske

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

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



38. ábra. a szélességű végtelen magas potenciálgödör

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

13.1. Az energiasajátfüggvények és sajátértékek meghatározása

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\varepsilon > 0 \tag{13.5}$$

jelölést a

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

egyenletet kapjuk, melynek általános megoldása

$$u\left(x\right)=A\sin\left(kx\right)+B\cos\left(kx\right), \tag{13.7}$$

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

$$u_n(x)=A\sin(k_nx)=A\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\qquad n=1,\ 2,\ 3,\ldots \tag{13.8}$$

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

$$\begin{aligned}\langle u_n|u_n\rangle &= \int\limits_0^a |u_n|^2\,dx = A^2\int\limits_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx\\ &= A^2\int\limits_0^a \frac{1-\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{2}dx = A^2\left\{\frac{1}{2}\left[x\right]_0^a-\frac{1}{2}\left[\frac{\sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{\frac{2n\pi}{a}}\right]_0^a\right\}\\ &= A^2\frac{a}{2}.\end{aligned} \tag{13.9}$$

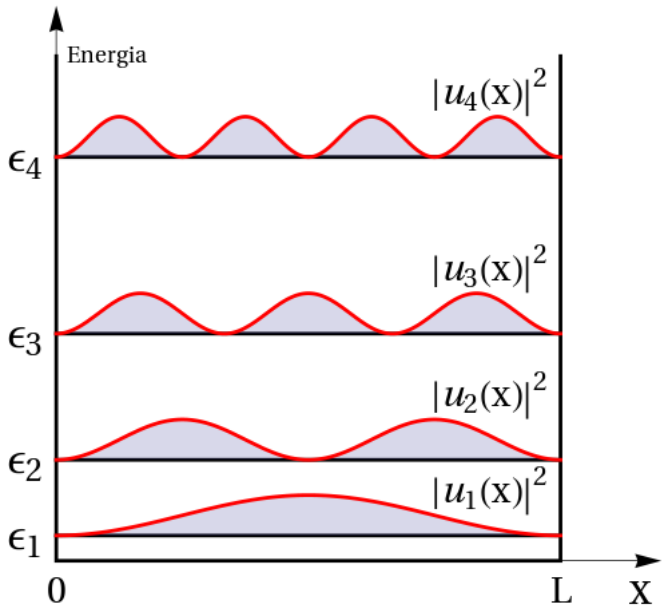
Mivel a normáltsághoz az $\langle u_n|u_n\rangle=1$ feltétel teljesülése szükséges, kapjuk, hogy $A=\sqrt{2/a}$. Visszahelyettesítve ezt az u_n-re vonatkozó (13.8) kifejezésbe:

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

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

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

$$\varepsilon_n=\frac{\hbar^2k_n^2}{2m}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2,\qquad \text{ahol } n=1,2,3,\ldots \tag{13.11}$$



39. ábra. A végtelen potenciálgödör sajátfüggvényeinek abszolútérték-négyzete

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

A klasszikus esetben a legalacsonyabb energiájú állapotban a részecske a potenciálgödörön belül nyugalomban van, azaz mind a mozgási, mind a potenciális energiája nulla. Ezzel szemben a kvantumos esetben a legkisebb energia $\varepsilon_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$. Ezt alapállapoti energiának szoktuk nevezni.

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

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

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

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

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

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

13.2. Kifejtés a sajátfüggvények szerint

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

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

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

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

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

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

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

A hullámfüggvény a $t = 0$ időpontban

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

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

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

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

13.3. A sajátfüggvények paritása

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

$$x \to x + a/2 \tag{13.19}$$

helyettesítést végezzük. Ekkor

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

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

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

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

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

$$\psi(x) = \sum_n c_n v_n(x), \tag{13.22}$$

ahol a kifejtési együtthatókat a

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

integrál adja.

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

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

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

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

$$\Pi\psi(x) = \psi(-x) \tag{13.24}$$

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

$$\Pi\psi^+(x) = \psi^+(x), \tag{13.25}$$

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

$$\Pi\psi^-(x) = -\psi^-(x) \tag{13.26}$$

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

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

$$\Pi\psi(x) = \lambda\psi(x). \tag{13.27}$$

Alkalmazzunk egy újabb tükrözést, ekkor egyrészt

$$\Pi^2\psi(x) = \Pi\lambda\psi(x) = \lambda^2\psi(x), \tag{13.28}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Abban a speciális esetben, ha H nem változik a tükrözéskor

$$\Pi H\Psi(x,t) = H\Pi\Psi(x,t) \tag{13.35}$$

kapjuk, hogy

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

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

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

és a

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

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

$$(\Pi H - H\Pi)\Psi(x,t) = 0, \tag{13.39}$$

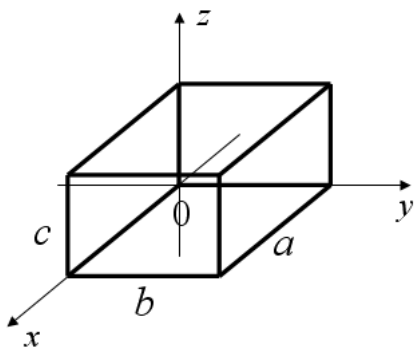
azaz a $\Pi H - H\Pi =: [\Pi, H]$ kommutátor tűnjön el:

$$[\Pi, H] = 0. \tag{13.40}$$

ami éppen a H tükrözési szimmetriáját fejezi ki a kvantummechanikában.

14. Részecske háromdimenziós dobozban

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



40. ábra.

Ez a következő potenciálnak felel meg

$$V(x,y,z) = V(x) + V(y) + V(z), \tag{14.1}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Az előző szakasz eredményeit felhasználva a lehetséges k-k:

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

a normált hullámfüggvények és energiák:

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

A részecske teljes hullámfüggvénye és teljes energiája pedig

$$\begin{aligned}u_{n_1n_2n_3}(x,y,z)&=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n_1\pi x}{a}\right)\sqrt{\frac{2}{b}}\sin\left(\frac{n_2\pi y}{b}\right)\sqrt{\frac{2}{c}}\sin\left(\frac{n_3\pi z}{c}\right),\\ k^2&=k_1^2+k_2^2+k_3^2=\pi^2\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\right),\\ \varepsilon_{n_1n_2n_3}&=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\right).\end{aligned} \tag{14.8}$$

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

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

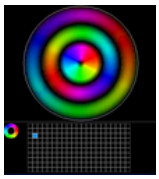
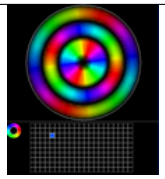
Ilyenkor a részecske energiája

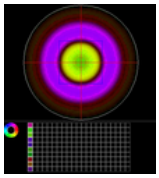
$$\varepsilon_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right). \tag{14.9}$$

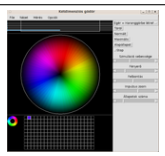
A legkisebb lehetséges energiát, csakúgy mint az általános doboz esetén, most is az $n_1 = n_2 = n_3 = 1$ esetben kapjuk, amelynek értéke $\varepsilon_{111} = 3\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} =: \varepsilon(0)$, a neki megfelelő $u_{111}(x, y, z)$ az alapállapot. Ha most megvizsgáljuk a lehetséges magasabb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

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

14.1 Feladat: Mutassuk meg, hogy egy degenerált energianívóhoz tartozó két különböző energiasajátfüggvény lineáris kombinációja is ugyanehhez a sajátértékhez tartozó sajátfüggvény.
14.2 Feladat: A kockába zárt részecske esetén hányadik gerjesztett nívó a $12\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$ energia, és hányszorosan degenerált? Melyik az ezt követő nívó, és az hányszor degenerált?

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

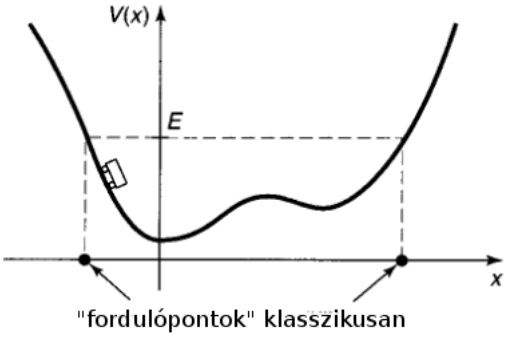
HULLÁMCSOMAG KÉTDIMENZIÓS KÖR ALAKÚ DOBOZBAN		
		Hullámcsomag terjedése, szétfolyása majd újraegyesülése kétdimenziós, végtelen potenciálfalakkal határolt kör alakú dobozban. A kis négyzetek a sajátállapotok betöltési valószínűségének és fázisának a szemléltetésére szolgálnak, a hullámcsomagot adó szuperpozícióban maga a szín az adott állapot időfüggő fázisát, míg a fekete felé csökkenő intenzitás az amplitúdót kódolja.

KÉTDIMENZIÓS POTENCIÁLGÖDÖR		
		Ez a java applet kétdimenziós, kör keresztmetszetű végtelen potenciálgödörben mozgó kvantumos részecske dinamikáját modellezi. A további magyarázatokat és beállítási lehetőségeket illetően olvassuk el a „Részletes leírás”-t. RÉSZLETES LEÍRÁS

15. Mozgás általános egydimenziós potenciálokban

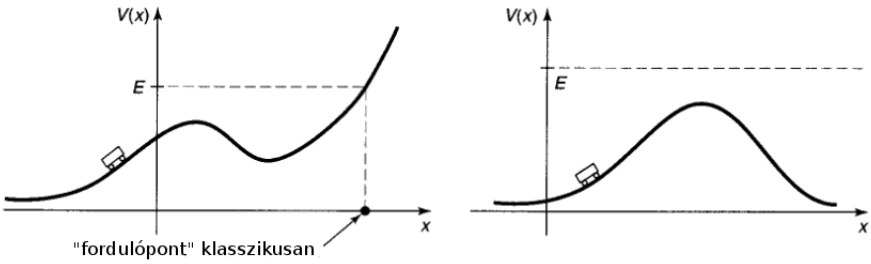
Klasszikus eset:

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



41. ábra. Kötött állapotokat megengedő potenciál

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

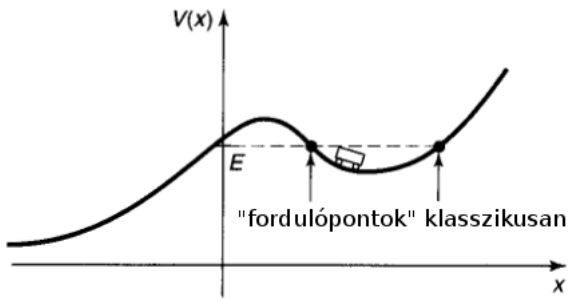


42. ábra. Szórt állapotokat megengedő potenciálok

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

Kvantumos eset:

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



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

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

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

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

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

$$\varepsilon < 0 \Longrightarrow \text{kötött állapot}, \tag{15.3}$$

$$\varepsilon > 0 \Longrightarrow \text{szórt állapot}. \tag{15.4}$$

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

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

az a határföltétel felel meg, hogy

$$x \to -\infty \qquad u_k(x) = e^{ikx} + r(k)e^{-ikx}, \tag{15.5}$$

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

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

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

$$T = \left|\frac{j_t}{j_i}\right|, \qquad R = \left|\frac{j_r}{j_i}\right|. \tag{15.7}$$

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

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

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

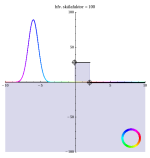
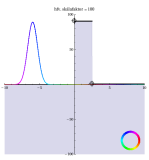
Az itt leírt eredmények arra az esetre vonatkoznak, ha a potenciálon szóródó részecske jó közelítéssel meghatározott energiájú. A (15.5) és (15.6) aszimptotikus föltételt kielégítő függvények azonban nyilvánvalóan nem normálhatók, hasonlóan a de Broglie-féle hullámokhoz.

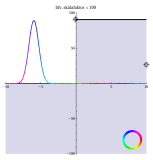
Egy valódi részecskét viszont nem egy de Broglie hullámmal, hanem ezeknek olyan szuperpozíciójával írunk le, amely térben többé-kevésbé lokalizált. Az ilyen valódi normálható hullámfüggvénnyel jellemzett részecske szóródásának időfüggésének leírásakor a következőképpen kell eljárni. A kezdeti hullámfüggvényt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

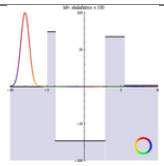
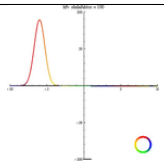
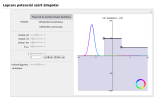
$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n u_n(x) e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} + \int c(\varepsilon) u_\varepsilon(x) e^{-i\varepsilon t/\hbar} d\varepsilon \tag{15.9}$$

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

Ilyen feladatok megoldását mutatják az alábbi animációk:

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

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

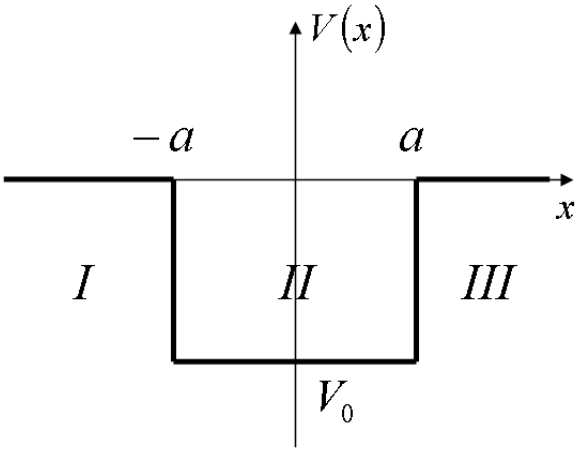
GAUSS-CSOMAG SZÓRÓDÁSA LÉPCSŐS POTENCIÁLON		
		Gauss típusú hullámfüggvénnyel modellezett részecske érkezik egy bonyolultabb lépcsős potenciálhoz, egy két oldalról gáttal körülvett gödörhöz.
		Gauss típusú hullámfüggvénnyel modellezett részecske érkezik vonzó potenciál gödörhöz. A részecske bizonyos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

16. Véges magasságú, szimmetrikus potenciálgödörben lévő részecske

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

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

ahol $a > 0$.



44. ábra. Szimmetrikus potenciálgödör

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

16.1. Kötött állapotok

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

I. **tartomány** ($x < -a$):

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

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

Átrendezve ezt, az alábbi egyenletet kapjuk:

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

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

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

Ennek az egyenletnek a megoldása

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

ahol A és B egyelőre ismeretlen konstansok.

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

$$u_I\left(-\infty\right) = 0. \tag{16.6}$$

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

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

alakú.

II. **tartomány** $(-a < x < a)$**:**

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

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

Átrendezve:

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

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

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

Ennek a differenciálegyenletnek a megoldása

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

ahol C és D a peremfeltételekből meghatározható konstansok.

III. **tartomány** $(x > a)$**:**

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

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

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

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

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

$$u_{III}(\infty) = 0 \Longrightarrow G = 0. \tag{16.13}$$

A peremfeltételt teljesítő megoldás ebben a tartományban tehát:

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

Összefoglalva tehát a megoldások alakja a három tartományban:

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

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

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

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

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

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

melyek az alábbi egyenletekre vezetnek:

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

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

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

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

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

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

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

$$k\cot(ka) = -\kappa. \tag{16.22}$$

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

$$k\tan(ka) = \kappa. \tag{16.23}$$

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

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

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

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

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

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

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

és

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

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

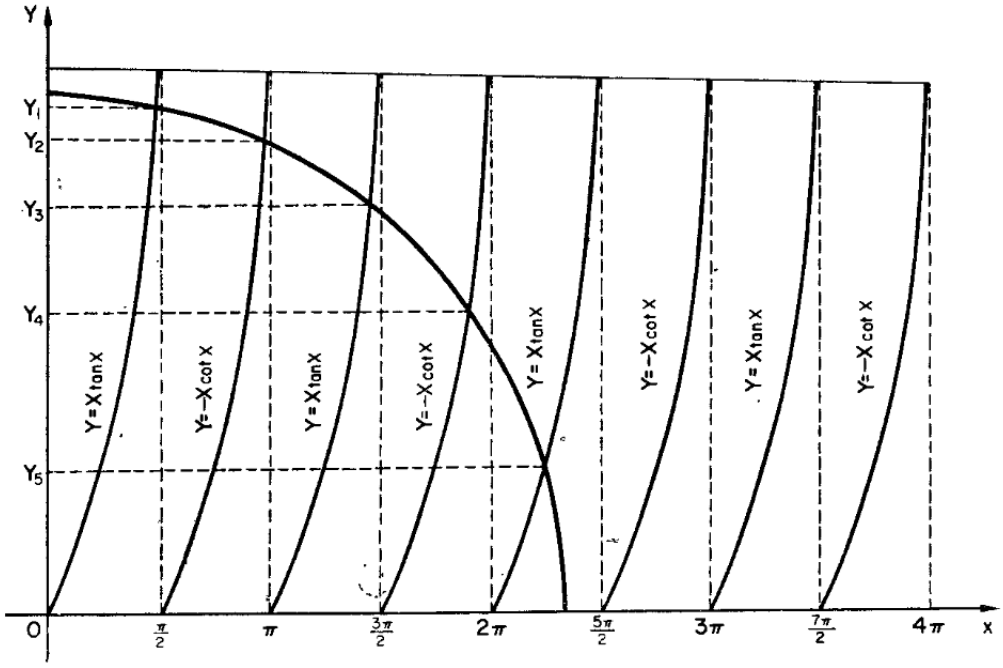
$$\begin{aligned} X^2 + Y^2 &= \frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2} a^2 - \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} a^2 \\ &= \frac{2m(\varepsilon - V_0 - \varepsilon)}{\hbar^2} a^2 = -\frac{2ma^2 V_0}{\hbar^2} \\ &= \frac{2ma^2 |V_0|}{\hbar^2} = R^2. \end{aligned} \tag{16.28}$$

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

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

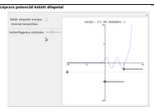
$$\textbf{(2)} \quad \begin{cases} X \cot X = -Y \\ X^2 + Y^2 = \frac{2ma^2|V_0|}{\hbar^2} \end{cases} \tag{16.30}$$

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



45. ábra. A kötött állapotok energiaszintjeinek meghatározása grafikus megoldásással

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

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

16.2. Szórt állapotok

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

I. tartomány $(x < -a)$**:**

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

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

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

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

melynek általános megoldása

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

ahol A és B konstansok.

II. **tartomány** $(-a < x < a)$**:**

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

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

Átrendezve:

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

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

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

Ennek a differenciálegyenletnek általános megoldását most célszerű az

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

alakba írni, ahol C és D konstansok.

III. **tartomány** $(x > a)$**:**

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

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

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

$$u_{III}(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}. \tag{16.38}$$

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

$$G = 0.$$

A megoldás ebben a tartományban tehát:

$$u_{III}(x) = Fe^{ikx}. \tag{16.39}$$

Összefoglalva a megoldásokat a három tartományban:

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

Illesztés az *I.* és *II.* tartományok határán:

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

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

melyekből:

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

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

Illesztés a $II.$ és $III.$ tartományok határán:
Itt az alábbi egyenleteknek kell teljesülniük:

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

melyekből:

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

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

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

$$j_t = \frac{\hbar k}{m}\left|F\right|^2. \tag{16.47}$$

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

$$j_i = \frac{\hbar k}{m}\left|A\right|^2. \tag{16.48}$$

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

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

Vagyis megegyezik a két hullám amplitúdója hányadosának abszolútérték-négyzetével.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

melyből kifejezve F-et:

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

Ebből pedig a transzmisszió:

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

azaz

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

Alakítsuk át kissé a nevezőt:

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

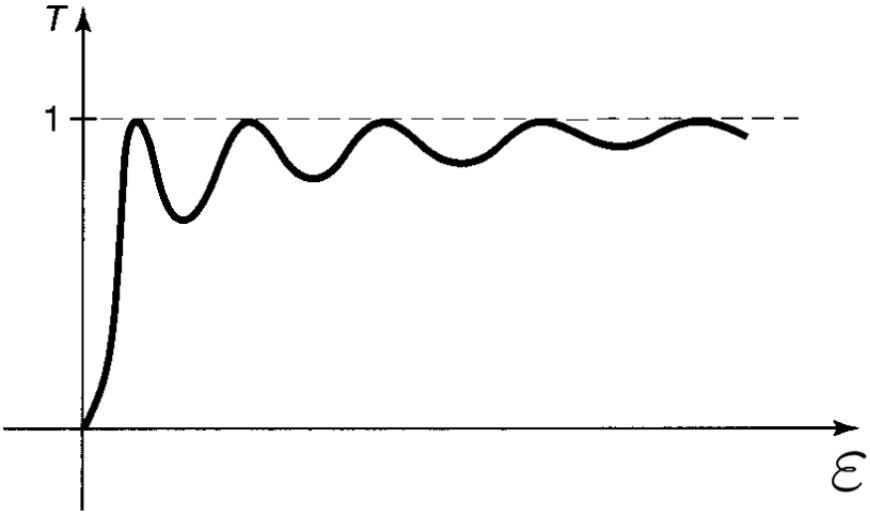
Mivel $q^2 = \frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2}$ és $k^2 = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}$, megadhatjuk T-t, mint a, V_0 és ε függvényét, ugyanis:

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

melynek felhasználásával

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

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



46. ábra. A transzmisszió a részecske energiájának függvényében

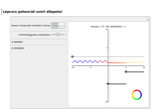
A transzmisszió tökéletes ($T = 1$), ha

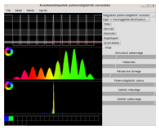
$$\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m\left(\varepsilon_n - V_0\right)} = n\pi, \tag{16.61}$$

ahol n tetszőleges egész szám. Ebből

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

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

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

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

17. A kvantummechanika szabályai

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

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

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

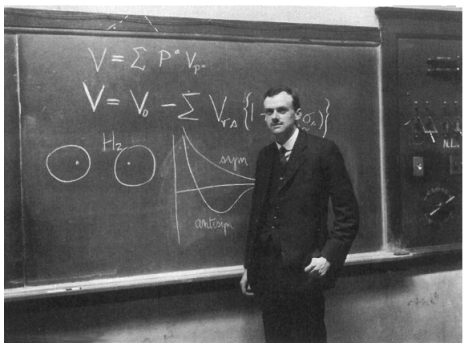
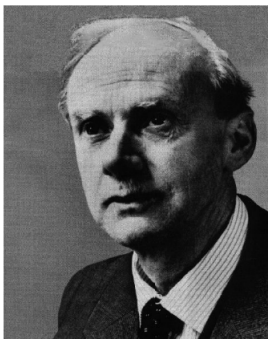
Az elemeket – vagyis az állapotokat – szokás vektornak is nevezni: az eredetileg P. Dirac angol fizikus által bevezetett és manapság teljesen elterjedt jelölésük a $|\ \rangle$ ketnek nevezett szimbólumban szereplő betű pl. $|\psi\rangle$. A lineáris vektortér alapvető matematikai tulajdonságai alapján,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

$$|\psi\rangle = c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle . \tag{17.1}$$

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

Egy adott kvantumfizikai problémához egy alkalmasan választott lineáris tér tartozik.

Paul Dirac(1902-1984)

47. ábra.

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

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

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

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

$$(|\psi\rangle, |\varphi\rangle + |\chi\rangle) = \langle\psi|\varphi\rangle + \langle\psi|\chi\rangle, \qquad \langle\psi|a\varphi\rangle = a\,\langle\psi|\varphi\rangle, \tag{17.3}$$

ahol a egy tetszőleges komplex szám, de a tényezők sorrendjének fölcserélésekor az eredmény a komplex konjugált szám:

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^*, \tag{17.4}$$

ahol * a komplex konjugálást jelenti. Az ilyen típusú komplex értékű belső szorzatot hermitikusnak szokás nevezni C. Hermite francia matematikus nyomán. Ebből következően $\langle\psi|\psi\rangle$ valós, és posztuláljuk, hogy

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0, \text{ és } \langle\psi|\psi\rangle = 0 \text{ akkor és csak akkor, ha } |\psi\rangle = 0. \tag{17.5}$$

Abból, hogy előírjuk, hogy a belső szorzat legyen lineáris a második tényezőben ugyanakkor hermitikus is következik, hogy a belső szorzat konjugált lineáris az első tényezőben: $(a\,|\psi\rangle, |\varphi\rangle) = a^*(|\psi\rangle, |\varphi\rangle) = a^*\,\langle\psi|\varphi\rangle$, azaz az első tényezőböl az azt szorzó szám komplex konjugáltja emelendő ki.

Két vektor $|\varphi\rangle$ és $|\psi\rangle$ ortogonális (merőleges), ha $\langle\psi|\varphi\rangle = 0$.

Szokásos a $\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} =: \|\psi\|$ jelölés, és $\|\psi\|$-t a vektor hosszának vagy normájának nevezzük. Megfelelő állandóval való szorzással mindig el lehet érni, hogy a norma $\|\psi\| = 1$ legyen.

A $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \ldots, |\varphi_n\rangle$ elemekről azt mondjuk, hogy ortogonális és normált (röviden ortonormált) rendszert alkotnak, ha egyikük sem a nulla vektor, és

$$\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 \text{ ha } i = j \\ 0 \text{ ha } i \neq j \end{cases} \tag{17.6}$$

Ha a tér n dimenziós, akkor az így megadott vektorrendszer egy úgynevezett bázist alkot, azaz lineáris kombinációjukkal bármely vektor előállítható.

Végtelen dimenziós terekben végtelen sok ilyen páronként ortogonális és normált vektor létezik. Végtelen dimenziós teret kell használni, ha pl. egy részecske helyéről akarunk információt megadni a kvantummechanikában, amely rendszerint végtelen sok lehetőséget jelent. Annak ellenére, hogy egy részecske térbeli helyének a valós számokkal megegyező számosságú, azaz kontinuum sok lehetősége van, érdekes módon azt mégis meg lehet adni megszámlálhatóan végtelen számú valószínűségi amplitúdóval.

Egy konkrét probléma esetén, egy állapotokat megadó vektort rendszerint valamilyen alkalmas reprezentációban adunk meg. Ez másképpen azt jelenti, hogy az állapotok terében választunk egy konkrét *ortonormált* bázist, az állapotot kifejtjük a bázisvektorokon, és a kifejtési együtthatók halmazával adjuk meg az állapotot. A $|\psi\rangle$ állapotnak az $|u_k\rangle$ bázison vett kifejtése

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k\,|u_k\rangle, \tag{17.7}$$

ahol egy c_j együtthatót a $c_j = \langle u_j\,|\psi\rangle$ belső szorzat ad meg. Ez utóbbi a (17.7) egyenlőségből kapható, ha azt szorozzuk az $\langle u_j|$-vel. A c_k együtthatók eszerint annak amplitúdói, hogy a $|\psi\rangle$

állapotú részecske az u_k állapotban van. Ha $|\psi\rangle$ normált, akkor $\sum_k |c_k|^2 = 1$. Ha a probléma véges (n) dimenziós, akkor a kifejtési együtthatók száma véges. Két vektor belső szorzatát az $|u_k\rangle$ reprezentációban a

$$\langle\psi|\varphi\rangle = (|\psi\rangle, |\varphi\rangle) \equiv (\sum_k c_k |u_k\rangle, \sum_j d_j |u_j\rangle) = \sum_k c_k^* d_k \tag{17.8}$$

szorzatösszeg adja meg, ahol kihasználtuk a belső szorzat tulajdonságait és az $|u_k\rangle$ bázis ortonormáltságát.

3. A kvantumos részecskék állapotait rendszerint egy berendezéssel vizsgáljuk, ez a bejövő állapotot egy másik állapotba transzformálja. Ezért egy mérőberendezést a kvantummechanikában egy A lineáris transzformációval más néven *lineáris operátorral* írunk le, amely valamely állapothoz egy másik állapotot rendel:

$$|\psi\rangle \to |\phi\rangle = A|\psi\rangle. \tag{17.9}$$

A linearitás azt jelenti, hogy $A(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1 A|\psi_1\rangle + c_2 A|\psi_2\rangle$.

Bizonyos bemenő állapotok nem változnak, a kimenet biztosan megjósolható, s lényegében megegyezik a bemenő állapottal. Ezeket a berendezés sajátállapotainak nevezzük. A lehetséges kimenetek pedig a bemenő részecske állapotától függetlenül mindig a berendezés sajátállapotainak valamelyike. Ezek ortogonálisak, $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = 0$ ha $i \neq j$, illetve az előző konvenció szerint $\langle\varphi_i|\varphi_i\rangle = 1$, azaz a kimenetek ortonormált bázist alkotnak a (17.6) előírásnak megfelelően.

A kimenetekhez azon kívül, hogy azok újabb állapotok, bizonyos valós számokat rendelünk, ezek a mérési eredmények. Pl. a spin értéke bizonyos irányban, lehet $\hbar/2$ vagy $-\hbar/2$, vagy a mért koordináta értéke lehet valamilyen vonatkoztatási ponttól (origó), valamilyen irányban pl. x tengely mentén mért előjeles távolság, azaz x koordináta.

Most megkonstruáljuk a lineáris operátor matematikai alakját a sajátállapotainak és a megfelelő mérési eredményeink segítségével. Legyenek a berendezés sajátállapotai a $|\varphi_i\rangle$ állapotok, és rendeljük a φ_i kimenethez valamilyen meggondolás alapján az α_i valós számmal megadott mért értéket. Először tekintsük a berendezés egyetlen kimenő csatornáját, amelyik mondjuk a $|\varphi_i\rangle$ sajátállapotnak felel meg, a többit pedig zárjuk le. Ehhez a szituációhoz rendeljük hozzá az $E_i = |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ szimbólumot, amelyet operátornak tekinthetünk, abban az értelemben, hogy egy tetszőleges $|\psi\rangle$ állapothoz az E_i rendelje hozzá az

$$E_i|\psi\rangle = |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle = |\varphi_i\rangle c_i \tag{17.10}$$

vektort, ahol c_i a $\langle\varphi_i|\psi\rangle$ belső szorzatnak megfelelő valószínűségi amplitúdó. A kifordított $\langle\varphi_i|$ tehát itt műveletként viselkedik, a mögötte lévő vektorral vett belső szorzatát kell tekinteni. Ha a $|\psi\rangle$ éppen valamelyik sajátállapottal azaz $|\varphi_j\rangle$-vel egyezik meg akkor láthatólag

$$E_i|\varphi_j\rangle = |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = |\varphi_i\rangle\delta_{ij}, \tag{17.11}$$

mivel $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$. Ez felel meg annak, hogy ha a bejövő állapot a nyitott csatornának megfelelő sajátállapot, akkor azt a berendezést reprezentáló E_i operátor változatlanul átengedi, a többi csatornának megfelelő *sajátállapotot* viszont nem engedi át, tehát kinullázza. Ha minden csatorna nyitva van, akkor a berendezést az egyes csatornákhoz tartozó E_i operátorok összessége jellemezi. A formalizmust még kiegészítjük azzal, hogy az egyes E_i operátorokat megszorozzuk a hozzájuk tartozó α_i számszerű mérési eredménnyel, s ez lesz a teljes berendezést reprezentáló operátor:

$$A = \sum_i \alpha_i E_i = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|. \tag{17.12}$$

Ez láthatólag egy lineáris operátor, mivel a belső szorzat lineáris, azaz tagonként végrehajtható, és a konstans kiemelhető.

A hatása egy tetszőleges $|\psi\rangle$-re: $A|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle \langle\varphi_i|\psi\rangle = \sum_i c_i\alpha_i |\varphi_i\rangle$ szerint fejezhető ki az A sajátállapotaival. Az A hatása egy $|\varphi_j\rangle$ sajátállapotra:

$$A|\varphi_j\rangle = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle \langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle \delta_{ij} = \alpha_j |\varphi_j\rangle . \tag{17.13}$$

Az itt látható

$$A|\varphi_j\rangle = \alpha_j |\varphi_j\rangle \tag{17.14}$$

egyenlőség a matematikailag szokásos értelemben mutatja, hogy a $|\varphi_j\rangle$-k az A operátor sajátvektorai, az α_j-k pedig a megfelelő sajátértékek. Érdemes megjegyezni a következőt. A (17.12) által definiált lineáris operátorokon túl az állapotok terén értelmezhetők olyan általánosabb lineáris operátorok is, amelyek nem írhatók a (17.12) alakba, tehát nem reprezentálnak fizikai mennyiségeket. Egy a sok egyéb lehetséges példa mellett, ha a (17.12)-ben az α_i valós számok helyett komplex számokat írunk. Az így kapott operátorok továbbra is lineárisak maradnak, amint arról egyszerűen meggyőződhetünk, de ezeket nem szokás fizikai mennyiségeknek tekinteni. A kvantummechanikában is találkozunk ilyenekkel a későbbiek során. Azokat az operátorokat, amelyeket valamilyen $|\varphi_i\rangle$ ortonormált bázissal és a hozzájuk tartozó α_i *valós* számokkal a (17.12) alakba lehet írni, önadjungált (néha hermitikus) operátoroknak nevezzük.

A föntiek alapján tehát kimondhatjuk a következő szabályt:

Egy mérőberendezés által mérhető fizikai mennyiséget a kvantummechanikában egy A lineáris transzformációval más néven lineáris operátorral írunk le. A fizikai mennyiségek mért eredményei az azokat reprezentáló operátorok sajátértékei, a mérés után kimenetként jelentkező állapotok pedig a megfelelő sajátvektorok.

Mint látni fogjuk egy szorzattéren értelmezett lineáris operátor általános alakja $B = \sum_{i,j} b_{ij} |\varphi_i\rangle \langle\varphi_j|$, ahol $|\varphi_i\rangle$ valamilyen ortonormált bázis, a b_{ij}-k komplex számok. Az operátor hatását a $|\psi\rangle$ állapotra a $B|\psi\rangle = \sum_{i,j} b_{ij} |\varphi_i\rangle \langle\varphi_j|\psi\rangle$ képlettel adjuk meg, amely láthatólag a $|\varphi_i\rangle$ vektorok egy lineáris kombinációja. Rendeljük hozzá a B operátorhoz a $B^\dagger = \sum_{i,j} b^*_{ij} |\varphi_j\rangle \langle\varphi_i|$ operátort, amely szintén lineáris, és amelyet úgy kaptunk, hogy a b_{ij}-k helyett a komplex konugáltjukat írtuk és a φ_i-t és a φ_j-t megcseréltük. A $B^\dagger$ operátort a B operátor adjungáltjának, vagy hermitikus konjugáltjának nevezzük. Azokat az operátorokat amelyekre $B = B^\dagger$ önadjungált operátoroknak nevezzük.

17.1 Feladat: Milyen föltételt kell teljesítenie a b_{ij} számok mátrixának, hogy a B önadjungált legyen?

17.2 Feladat: Mutassuk meg, hogy egy A önadjungált operátor esetén érvényes a következő tulajdonság:

$$\langle\psi| A |\varphi\rangle = (|\psi\rangle , A|\varphi\rangle) = (A|\psi\rangle , |\varphi\rangle) = \langle\varphi|A|\psi\rangle^*$$

Alapvető fontosságú a kvantummechanikában az ún. spektráltétel (lásd lineáris operátorok elmélete), amellyel később fogunk foglalkozni. Eszerint egy A önadjungált operátor sajátvektoraival teljes ortonormált bázis adható meg a Hilbert-téren, azaz A sajátvektorai segítségével bármely vektor kifejthető.

4. Ha nem végzünk mérést, az állapotok akkor is változnak időben. Vagyis mialatt az idő múlik, az állapot változik: a változást a valós t paraméterhez hozzárendelt $t \to |\Psi(t)\rangle$ függvény adja, ahol a függvény lehetséges értékei az állapottér vektorai.

A kvantumrendszer időbeli változását egy differenciálegyenlet, a Schrödinger-egyenlet, másnéven dinamikai egyenlet írja le, melynek alakja:

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = H|\Psi(t)\rangle , \tag{17.15}$$

ahol H az energia mérésének megfelelő berendezéshez tartozó operátor, melynek neve történeti okok miatt Hamilton-operátor. A kvantummechanikában a Newton-egyenlet helyére a Schrödinger-egyenlet lép. A Schrödinger-egyenlet fontos tulajdonsága, hogy lineáris, azaz a lehetséges megoldások lineáris kombinációja is megoldás. Miért van több lehetséges megoldás? Azért, mert az

egyenlet – mint minden differenciálegyenlet – általános megoldása ún. integrációs állandókat tartalmaz, mégpedig annyit ahány dimenziós a $|\Psi(t)\rangle$-t tartalmazó vektortér. Ezeket az integrációs állandókat a kezdeti föltételek határozzák meg, azaz a $|\Psi(t=0)\rangle$ vektor, illetve ennek komponensei valamely bázisban. Két különböző megoldás tehát különböző kezdeti föltételeket jelent, s ezek lineáris kombinációja ismét más kezdeti föltételhez tartozik.

Mivel a dinamikai egyenlet szerint a H Hamilton-operátor kitüntetett szerepet játszik, a H sajátállapotai is kitüntettek: A

$$H\,|u_\varepsilon\rangle = \varepsilon\,|u_\varepsilon\rangle \tag{17.16}$$

energiasajátérték-egyenlet $|u_\varepsilon\rangle$ időfüggetlen megoldásai adják a stacionárius állapotokat, amelyek időfejlődése a legegyszerűbb

$$|u_\varepsilon\rangle\, e^{-i\varepsilon t/\hbar} \tag{17.17}$$

alakú, amint arról a (17.15) egyenletbe való visszahelyettesítéssel meggyőződhetünk. Ezek azok az állapotok, amelyek létezését Bohr még az "igazi" kvantummechanika megjelenése előtt posztulálta.

William R. Hamilton (1805-1865)

48. ábra.

1. TESZTSOROZAT