

Benedict Mihály

Kvantummechanika

Szegedi Tudományegyetem
Elméleti Fizikai Tanszék

Szeged
2006

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés és történeti előzmények	5
2. Feles spin és fotonpolarizáció	10
2.1. Stern-Gerlach berendezések	10
2.2. Fotonok polarizációja	12
2.3. A valószínűségi amplitúdó fogalma	14
3. Young kísérlet, De-Broglie hullámok	17
4. Hilbert tér és lineáris operátorai, Dirac jelölés	21
4.1. Lineáris operátorok:	24
4.2. Reprezentációk, operátorok mátrixa	26
4.3. Bázisváltás, más kifejtési együtthatók.	29
4.4. Projekciós operátor	30
5. Önadjungált operátorok spektrális előállítása	30
6. Fölcserélhető operátorok CSCO	35
7. L^2 és az L^2-höz nem tartozó bázisok	37
7.1. Az L^2 tér definíciója	37
7.2. Az L^2 -höz nem tartozó, általánosított bázisok.	39
7.2.1. Síkhullámok	39
7.2.2. Delta függvények	40
7.2.3. Egyéb általánosított bázisok.	40
8. A koordináta és az impulzus operátora	41
8.1. X és P nem fölcserélhető:	44
9. A kvantummechanika posztulátumai	44
10. Mérések, középérték, szórás	48
11. Heisenberg egyenlőtlenség	50
12. Időfejlődés, kontinuitási egyenlet	55
12.1. A Schrödinger egyenlet általános tulajdonságai:	55
12.2. Kontinuitási egyenlet	57

13. A várható értékek időfejlődése, Ehrenfest tétele	58
14. Konzervatív rendszerek	59
15. Mozgásállandók, Bohr frekvenciák	61
15.1. Mozgásállandók	61
15.2. Bohr frekvenciák és a kiválasztási szabályok eredete	62
16. A szabad részecske kvantummechanikai tárgyalása	63
17. A harmonikus oszcillátor sajátértékproblémája	66
18. Az impulzusmomentum algebrai elmélete	72
19. Feles spin sajátállapotai	77
20. EPR paradoxon, spinkorrelációk, Bell egyenlőtlenség	79
21. Pályaimpulzusnyomaték	84
22. A térbeli paritás	89
22.1. A paritás definíciója	89
22.2. Kapcsolat a pályaimpulzusmomentummal	90
23. Centrális erőter, radiális egyenlet	91
24. A radiális egyenlet megoldásainak, aszimptotikus viselkedése	93
25. Coulomb potenciál kötött állapotai	94
26. A H atom spektruma	97
27. Azonos részecskék	100
27.1. Független részecskék	107
28. Többelelektronos atomok	110
29. Külső elektromágneses mező	112
30. Zeeman effektus	114
30.1. Az energianívók fölhasadása	114
30.2. A spektrumvonalak intenzitása és polarizációja	115

31. Stacionárius perturbációszámítás	119
31.1. Nemdegenerált nívó perturbációja	121
31.1.1. Elsőrendű korrekciók	121
31.1.2. Másodrendű korrekció	123
31.2. Degenerált energianívó perturbációja	124
32. A H atom Stark effektusa	126
32.1. Az alapállapot	126
32.2. Az első gerjesztett állapot Stark effektusa	129
33. A He atom energiaszintjei	129
33.1. A sajátértékprobléma nulladik közelítésben	130
33.2. Az energiakorrekciók első rendben	133
33.2.1. Alapállapot	133
33.2.2. Gerjesztett állapotok, kicserélődési kölcsönhatás	134
34. A variációs módszer	136
34.1. A Ritz féle módszer	136
34.2. A He atom alapállapot energiája	137
35. Evolúciós operátor	138
35.1. Schrödinger és Heisenberg kép	141
36. Időfüggő perturbáció, kölcsönhatási kép	141
37. A lineáris polarizálhatóság elmélete	144
38. Abszorbcio és indukált emisszió	146
39. A mágneses rezonancia, a Rabi probléma	149

1. Bevezetés és történeti előzmények

A 19. század végén a fizika számos jelenségét sikerült leírni, melyek közül csak néhány igen fontos területet tudunk itt felsorolni. A klasszikus Newton-féle mechanika Euler, Lagrange, Hamilton munkássága alapján ekkorra egy igen mélyen kidolgozott elméletté vált. Faraday, Maxwell, Hertz és sokan mások munkái nyomán ismertek voltak az elektromágneses mező viselkedésének törvényszerűségei, világossá vált, hogy fény is elektromágneses hullám. A hőtant és az anyag korpuszkuláris elméletét Boltzmann és Gibbs munkái összekötötték.

Maradt azonban néhány olyan kísérleti tény, amelynek értelmezése az addig ismert törvényszerűségek alapján nem sikerült. Két ilyen problémakört emelünk ki, az egyik az üregsugárzás spektrális eloszlása, a másik az atomok vonalas színképe. Az üregsugárzás spektrumát 1900-ban Plancknak sikerült megmagyarázni két föltételezés alapján. Egyrészt, hogy az üregben kialakuló elektromágneses állóhullámok egy-egy megfelelő ν frekvenciájú harmonikus oszcillátornak tekinthetők, másrészt pedig azzal, hogy az oszcillátorok energiája csak a diszkrét, azaz kvantumozott $h\nu$ értékek egész számú többszörösével változhat:

$$E_n = nh\nu, \quad (1.1)$$

ahol $n = 0, 1, 2, \dots$, egész szám, h pedig a Planck állandónak nevezett univerzális konstans, melynek értéke

$$h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J} \quad (1.2)$$

Ebből az következik, hogy alacsony hőmérsékleten, illetve nagy frekvenciákon, már nem érvényes az ekvipartíció törvénye, amely szerint T abszolút hőmérsékleten a környezetével egyensúlyban lévő oszcillátor átlagos energiája kT . Ugyanis, ha $h\nu \gg kT$, akkor az oszcillátor egyáltalán nem képes fölvenni újabb energiakvantumot, azaz az átlagos energiája kisebb lesz mint kT . Ennek alapján Planck levezette a kísérletekkel igen jó egyezésben lévő Planck féle sugárzási törvényt, amely az első lépés volt a kvantumelmélet kialakulása felé vezető úton. A törvény levezetését, mivel az tipikusan statisztikus megfontolásokat igényel, a statisztikus fizika keretében szokás tárgyalni.

Planck gondolatát vitte tovább Einstein, amikor 1905-ben azt föltételezte, hogy egy anyag felületére eső fénycsugárban az energia szintén kvantumozott természetű abban az értelemben, hogy az atomos anyag a fényből $h\nu$ nagyságú fénycsugárkvantumok egész számú többszörösével képes energiát fölvenni illetve leadni. Ennek alapján

meg lehetett magyarázni a fényelektromos hatást, vagy másnéven fotoeffektust, amelynél egy elegendően nagy frekvenciájú fény egy fém felületéből elektronokat vált ki. A fotonokat nulla nyugalmi tömegű részecskéknek föltételezve, amikor is $1.05457266 \times 10^{-34} J$ az energia és az impulzus között a $p = E/c$ összefüggés áll fenn, a foton impulzusára a $p = h\nu/c = h/\lambda$ eredmény adódik.

A továbbiakban a kvantummechanika szokásos írásmódjának megfelelően bevezetjük a

$$h/(2\pi) = \hbar = 1.055 \times 10^{-34} J \quad (1.3)$$

mennyiséget, amivel egy adott frekvenciájú elektromágneses síkhullámhoz társított foton energiája és impulzusa a következő alakban írható

$$E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (1.4)$$

ahol $\mathbf{k} = (2\pi/\lambda)\mathbf{s} = (\omega/c)\mathbf{s}$, \mathbf{s} a síkhullám terjedési iránya. A mező ilyen diszkrét szerkezetét és a fenti formulákat jóval később, 1922-ben a Compton effektus alapján még részletesebben igazolták. Azaz a fény kettős természete kísérletileg is teljesen megalapozottá vált.

Feladat: Számítsuk ki egy foton által meglökött elektron esetén a foton hullámhosszának megváltozását a szórási szög függvényében (Compton effektus <http://www.launc.tased.edu.au/online/sciences/physics/compton.html>)

A másik igen rejtélyes kérdés az atomok vonalas színeképek problémája volt. Mint ismert, ritka gázokban elektromos kisüléssel gerjesztett atomok spektrumát vizsgálva, az atomok csak bizonyos meghatározott hullámhosszakon sugároznak, amit a klasszikus fizika alapján nem lehet értelmezni. Az 1911-ben Rutherford által fölállított atommodell szerint az atom egy kisméretű nehéz magból és a körülötte a mag méreténél jóval nagyobb átmérőjű pályán keringő elektronokból épül föl. Az elektronokat a magtól származó Coulomb erő tartja a pályán. A keringő elektronnak azonban a mag felé mutató gyorsulása van, és emiatt az elektrodinamika törvényei szerint elektromágneses mezőt s így azzal energiát is kellene sugároznia. Ezáltal viszont energiáját elveszítve a magba kellene zuhannia, azaz az atom, mint olyan, megszűnne létezni. Ez azonban nem következik be.

Az atomok vonalas színeképek problémájának megoldására Niels Bohr 1914-ben két posztulátumot vezetett be. Ezek szerint:

1. Az atomokban léteznek bizonyos meghatározott diszkrét $E_1, E_2 \dots$ energiával bíró stacionárius pályák, amelyeken az elektronok anélkül is tartósan lehetnek, hogy közben sugárzással elveszítenék ezt az energiát.

2. Az elektronok két stacionárius állapot között átugorva olyan frekvenciájú fényt, fotonokat sugároznak ki, vagy nyelnek el, amelyre érvényes

$$E_1 - E_2 = h\nu_{12} \quad (1.5)$$

ahol emisszió történik, ha a kezdeti pálya ε_1 energiája nagyobb mint a végső ε_2 energia, illetve fordítva, abszorpció, azaz fotonelnyelés következik be, ha a végállapot energiája a nagyobb.

Ezeket a posztulátumokat a kvantummechanika, ahogyan azt a mai formájában is tekintjük, alapvetőbb elvekből kiindulva lényegében igazolja.

A kérdés azonban az, hogy egy konkrét fizikai problémánál mi határozza meg azokat a kivételes stacionárius állapotokat, amelyekről a posztulátumokban szó van. A legegyszerűbb atom, a hidrogén esetén, amelynek csak egyetlen elektronja van Bohr azt a modellt állította föl, hogy a klasszikusan megengedett pályák közül a stacionárius állapotokat abból a föltételből lehet meghatározni, hogy az elektron impulzusmomentuma a pálya mentén csak a $h/2\pi$ egész számú többszöröse lehet. Ez az "ad hoc", tehát csakis az adott problémához kitalált kvantumfeltétel valóban visszaadja a H atom spektrumának alapvető szerkezetét, a Rydberg állandót és az egyes kísérletileg is megfigyelt (Lyman, Balmer stb.) sorozatokat. Később A. Sommerfeld újabb finomításokat végzett és további hasonló kvantumfeltételek egészítette ki a Bohr féle előírást, miáltal a H atom színképének finomabb szerkezetére is helyes eredményt kapott. Mindazonáltal ezek a kvantumfeltételek nem tekinthetők kielégítőnek, mert csak egy adott problémára, a H atomra adtak helyes eredményt. A többelektronos atomok színképét ezekkel nem lehetett megmagyarázni, azokra semmilyen helyes eredményt nem lehetett a kvantumfeltételekből származtatni.

1923-ban Louis de Broglie azt a föltételezéssel élt, hogy a fotonokhoz hasonlóan minden részecske, tehát pl. a véges nyugalmi tömeggel rendelkező elektron is valamilyen értelemben hullámtermészettel is rendelkezik. Az x irányban haladó ω körfrekvenciájú elektromágneses monokromatikus síkhullám elektromos térerőssége, amely bizonyos értelemben a fotont jellemzi $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \cos(kx - \omega t)$ alakú. Írjuk itt a hullám fázisát, vagyis a cos függvény argumentumát a fönti 1.4 összefüggés alapján a

$$px/\hbar - Et/\hbar \quad (1.6)$$

alakba. Ebből kiindulva de Broglie azt javasolta, hogy az x tengely mentén mozgó *adott* p impulzussal és E energiával jellemzett *véges nyugalmi tömegű* részecskéhez

is az x helytől és a t időtől függő

$$\Psi_p(x, t) = Ce^{i(px/\hbar - Et/\hbar)} \quad (1.7)$$

komplex értékű függvényt, egy úgynevezett hullámfüggvényt rendeljük hozzá. Itt C egy szám, amelynek értékét egy későbbi konvencióval fogjuk rögzíteni. A $\Psi_p(x, t)$ függvény két szempontból is különbözik az elektromágneses hullámot leíró síkhullámtól. Noha az elektrodinamikában is szoktunk ilyen komplex írásmódot használni, a valódi térerősségeket az ott szereplő komplex függvényeknek mindig a valós részével azonosítjuk. Itt viszont a függvény eleve komplex. A másik különbség, a p és az E közötti kapcsolatban van. A foton esetén $E = pc$, ahol c a fénysebesség, s így fotonra, vagyis a fényre $\omega = ck$. Egy véges nyugalmi tömegű részecskére viszont az energia és az impulzus között bonyolultabb összefüggés van. A nemrelativisztikus esetre szorítkozva, egy szabad, vagyis erőmentes részecske esetén

$$E = \frac{p^2}{2m}, \quad (1.8)$$

s így

$$\Psi_p(x, t) = Ce^{i(px/\hbar - \frac{p^2}{2m}t/\hbar)}. \quad (1.9)$$

Itt tehát a hullám fázisában az idő együtthatója a térkoordináta együtthatójának négyzetével arányos.

Erwin Schrödinger a de Broglie féle hipotézist továbbfejlesztette, és kapcsolatba hozta a 19. században a W. R. Hamilton által fölismert érdekes törvényszerűséggel, mely szerint a klasszikus mechanika bizonyos szempontból a geometriai optika törvényeihez hasonló elvekkel is leírható. Ennek nyomán Schrödinger megvizsgálta azt a kérdést, hogy milyen lenne az a hullámterjedés, amelynek határeseteként a Hamilton féle geometriai optika fölfogható. Így jutott el a kvantummechanikában alapvető szerepet játszó Schrödinger egyenlethez, amelyben a részecske mozgását nem annak koordinátája és impulzusa, hanem egy hely és időadatoktól függő $\Psi(x, t)$ függvény írja le amely általánosabb mint a de Broglie féle hullám. Az egyenlet általános alakját a későbbiekben fogjuk tárgyalni. A történeti szempontból leglényegesebb eredmény itt az volt, hogy az egyenletet a hidrogén atomra alkalmazva, annak rögzített energiákhöz tartozó megoldásai csak akkor bizonyultak a helykoordináták nemszinguláris (nem végtelenné váló) függvényeinek, ha a tekintett energiaparaméter bizonyos jól meghatározott értékeket vett föl. Ezek az úgynevezett energiasajátértékek, s ezek a H atom esetén éppen megegyeztek a Bohr

féle modellből is kiadódó energiaértékekkel. Csakhamar világossá vált, hogy ez a helyes út az atomi jelenségek magyarázatára képes kvantummechanika kialakulása felé. Az atomi részecskék leírására a Schrödinger által bevezetett módszert hullámmechanikának nevezték el. Schrödinger eredetileg úgy gondolta, hogy a hullámfüggvény abszolút érték négyzete $|\Psi(x, t)|^2$ a részecske tömegsűrűségét adja meg a térben. Egy adott részecskét azonban mindig többé kevésbé jól lokalizáltan szinte pontszerűen detektálunk, míg a $|\Psi(x, t)|^2$ függvény a térben ezen méretnél jóval nagyobb kiterjedésűnek is adódhat. Ennek nyomán Max Born-tól származik az a ma elfogadott interpretáció, mely szerint a $|\Psi(x, t)|^2$ -nek valószínűségi jelentése van. A részecske helyének mérésekor pl. egy fotolemezen annak a valószínűsége, hogy a részecskét a t időpontban az x koordináta körüli Δx intervallumban regisztráljuk $|\Psi(x, t)|^2 \Delta x$. Ezt az interpretációt részletesen elemezni fogjuk a későbbiekben.

Schrödingerrel lényegében egy időben Werner Heisenberg, majd hozzá kapcsolódva Born és Pascual Jordan először a harmonikus oszcillátor diszkrét energiáira, majd az atomok diszkrét spektrumának magyarázatára is egy másfajta eljárást dolgoztak ki. A mai terminológiát használva a kvantumos részecske koordinátáját és impulzusát mátrixoknak tekintették, amelyek a szorzásra nézve nem fölcserélhető mennyiségek. Egydimenziós mozgás pl. egy lineáris harmonikus oszcillátor esetén olyan, a koordinátához rendelt X és az impulzushoz rendelt P_x mátrixokat kerestek, amelyeket különböző sorrendben összeszorozva különböző eredményt kaptunk, és a kétfajta szorzás különbsége az egységmátrix $i\hbar$ -szorosa:

$$XP_x - P_x X = i\hbar \mathbf{1}. \quad (1.10)$$

Ezen mátrixok segítségével fölírva a kérdéses fizikai problémához tartozó, a mechanikából ismert Hamilton függvényhez tartozó mátrixot, pl. az oszcillátor esetén a $H = P_x^2/2m + DX^2/2$ Hamilton mátrixot, annak sajátértékei visszadták a Bohr féle stacionárius energiákat. Az oszcillátor esetén ilyen módon a Planck féle hipotézistől egy kissé különböző $E_n = h\nu(n + 1/2)$, eredményt kapták. Az eljárást háromdimenziós mozgásra is kiterjesztve Wolfgang Paulinak sikerült a H atom stacionárius állapotait is meghatározni ezzel a módszerrel.

Az első látásra két igen különbözőnek látszó Schrödinger-, illetve Heisenberg-féle megközelítésről később kiderült, hogy szoros kapcsolatban vannak egymással. Ezt előbb maga Schrödinger, majd Paul Dirac végül egészen általánosan Neumann János mutatta meg, aki kidolgozta a kvantummechanika matematikai alapjait, amely általában véve egy végtelen dimenziós lineáris vektortér, egy ún. Hilbert

tér lineáris transzformációinak vagy másnéven operátorainak az elmélete. Ilyen általánosságban ezt az elméletet nem tudjuk tárgyalni, néhány olyan matematikai tényt azonban megismerünk majd, amelyekkel az elmélet fizikai lényege megragadható.

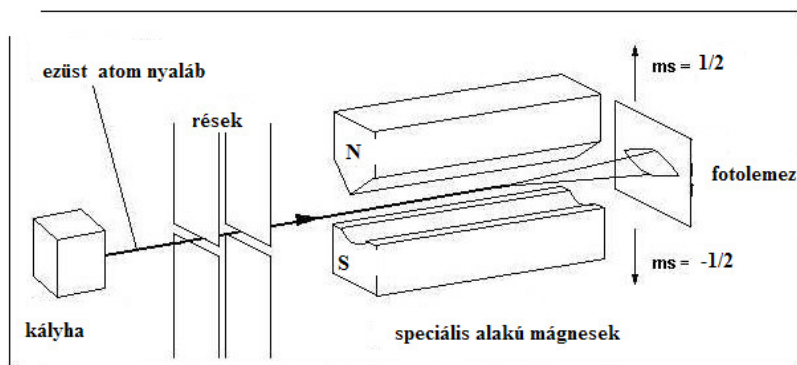
2. Feles spin és fotonpolarizáció

2.1. 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 eltérést nem a mágneses Lorentz erő gyakorolja, homogén mágneses térben nincs is ilyen effektus. Az eltérés oka az, hogy – mint kiderült – ezek az atomok mágneses dipólusmomentummal rendelkeznek, azaz úgy viselkednek mint egy kis mágnesű vagy egy kis köráram. Az ilyen tulajdonságú részecskékre az inhomogén mágneses mező erőit gyakorol. Emiatt az ezüstatomok eltérülnek a berendezés mögött. Az eltérés arányos a μ mágneses dipólusmomentumnak az inhomogenitás fő irányába (amely legyen most a z irány) mutató komponensével $-\mu \frac{\partial B}{\partial z}$.

A mágneses dipólusmomentum mindig mechanikai momentumhoz, perdület-hez, azaz impulzusnyomatékhoz kapcsolódik, azzal arányos. Azt gondolhatjuk, hogy a perdület vektora akármilyen irányú is lehet a térben, s ennek megfelelően a mágneses momentumok is tetszőleges irányúak lehetnek, tehát azt várjuk, hogy mindenféle irányba jönnek ki az ezüstatomok. Ehelyett lényegében csak két egymástól jól elkülönülő irányban történik eltérés, az atomnyaláb ketté válik. Megelőlegezve itt a későbbi eredményeket, kiderült hogy a két nyaláb a kísérletek szerint $\hbar/2$ illetve $-\hbar/2$ impulzusnyomatékú ezüstatomoknak felel meg. 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 az 1 ábrán látható.

Takarjuk ki most az egyik kimenő nyalábot, mondjuk a $-z$ irányba eltérülőt, és helyezzünk el egy másik SG berendezést az első után, amelynek az inhomogén tere ugyanolyan, azaz z irányú, mint az elsőé. Ekkor ennek $-z$ -nek megfelelő kimenetén már nem jelentkezik részecskék, ami érthetőnek látszik, hiszen azokat



A Stern-Gerlach kísérlet

1. ábra. A Stern-Gerlach berendezés vázlatja. A déli (S) pólustól az északi (N) felé mutató irányt választjuk z iránynak.

már kiszűrtük. Legyen azonban most a második berendezésünk olyan, hogy az inhomogén mágneses mező, az előzőre merőleges $+x$ irányú, azt tapasztaljuk, hogy az elsőből kijövő $+z$ típusú részecskék egyik fele a $+x$ másik fele a $-x$ irányba eltérülve jön ki. Ez nem meglepő, mert úgy gondoljuk, hogy a z szempontjából $+$ vagy $-$ irányba beállt részecskék az x irány szempontjából még lehetnek kétfélék. Tegyük azonban most egy harmadik berendezést is be, a második után, amelyben ismét z irányú a mágneses mező. Azt találjuk, hogy azon megint van $-z$ irányú eltérülés. Tehát ha a dolgot úgy képzeltük volna, hogy az első berendezés már kiszűrte a $-z$ irányú részecskéket, és azok már ezért nem jelenkeznek a harmadik berendezés után, az nem felel meg a valóságnak. A dolog talán még meglepőbb ha úgy csináljuk a dolgot, 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. Tegyük most be az x irányút a kettő közé ekkor 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 nem magyarázható!

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

2.2. Fotonok polarizációja

Egy lézernyaláb útjába kalcit kristályt helyezünk, amely kettősen tör. A nyaláb térben kétfelé ketté válik, és egy polarizátorral ellenőrizhető, hogy a két nyaláb egymásra merőleges irányban lineárisan poláros. A kalcit megfelelő beállításával elérhető, hogy az egyik nyaláb vízszintesen, a másik függőlegesen polarizált legyen. Vizsgáljuk a két nyaláb közül csak az egyiket, pl. kitakarjuk a másikat. Erre a célra a kalcit helyett helyett alkalmazhatunk egy olyan eszközt is – polarizátort – amely eleve csak valamely irányba poláros fényt enged át. Az erre merőleges irányú polarizátort betéve nincs átmenő fény. Tegyük közbe azonban egy az első polarizátor irányával 45^0 -ot bezáró polarizátort. Az átmenő fény ismét megjelenik.

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 van az, hogy ha a második polarizátor y irányú, akkor azon már nem megy át az x polarizált komponens. Ha azonban beteszünk a kettő közé egy 45^0 -os polarizátort, akkor mivel az x irányú rezgést felbonthatjuk egy és egy -45^0 -os rezgés összegére, a 45^0 -oson átmegy a fény (a teljes intenzitás fele), viszont ezután a polarizátor után a fény már 45^0 -os polarizációjú lesz, azaz elfelejti a korábbi rezgését. Ennek a 45^0 -ban polarizált fénynek viszont már megint lesz y irányú összetevője, ezért ezután már át fog menni a harmadik y irányba beállított polarizátoron is. Az intenzitása viszont ismét gyengülni fog.

Ha meggondoljuk hasonló dolog történik az ezüstatomokkal a három Stern-Gerlach berendezésen való áthaladás után. Azt kell feltételeznünk tehát, hogy a spin mérése szempontjából az ezüstatomok is valamiképpen hasonlóan viselkednek mint a fény, azaz mintha egy adott irányú impulzusmomentum valami fajta rezgési iránynak felelne meg, s emiatt az impulzusmomentummal rendelkező részecskék hasonlóan viselkednek mint a polarizáció szempontjából a fény. De hogyan lehetne a spinnel rendelkező részecskét úgy tekinteni mint egy valamilyen irányban rezgő vektort, hiszen itt diszkrét részecskék csapódnak be a detektorba. Mégis erről van szó, és valójában a fény polarizációjánál is föllép ez a meglepő jelenség, ha figyelembe vesszük, hogy ha a polarizátoros berendezésnél a fényforrásból bejövő intenzitást gyengítjük, akkor itt is megjelenik a diszkréttség: a fotonokat számlálni lehet. Mivel a fény esetében a hullámképből már tudjuk hogy minek kell kijönni, a dolgot ennek segítségével elemezhetjük, és a kvantummechanika bizonyos

törvényszerűségeit ennek alapján megállapíthatjuk.

Tekinsünk tehát egy fényforrást, egy lézert, amelyből kijövő fénysugarat, melynek terjedési iránya legyen a z tengely iránya. Ezt átengedjük egy polarizátoron, amely egy a z -re merőleges síkban lévő az x tengellyel valamilyen θ szöget bezáró \hat{e}_θ egységvektor által kijelölt irányba polarizál. Engedjük át ezt a polarizált fényt ezután egy kettősen törő kalcit kristályon, amelyből a vízszintes \hat{x} és a függőleges \hat{y} egységvektorok által kijelölt irányban polarizált fény lép ki térben különböző irányokba. Mivel az \hat{e}_θ az x tengellyel θ szöget zár be, akkor az \hat{e}_θ irányú elektromos vektort fölbonthatjuk

$$\hat{e}_\theta = \hat{x} \cos \theta + \hat{y} \sin \theta \quad (2.1)$$

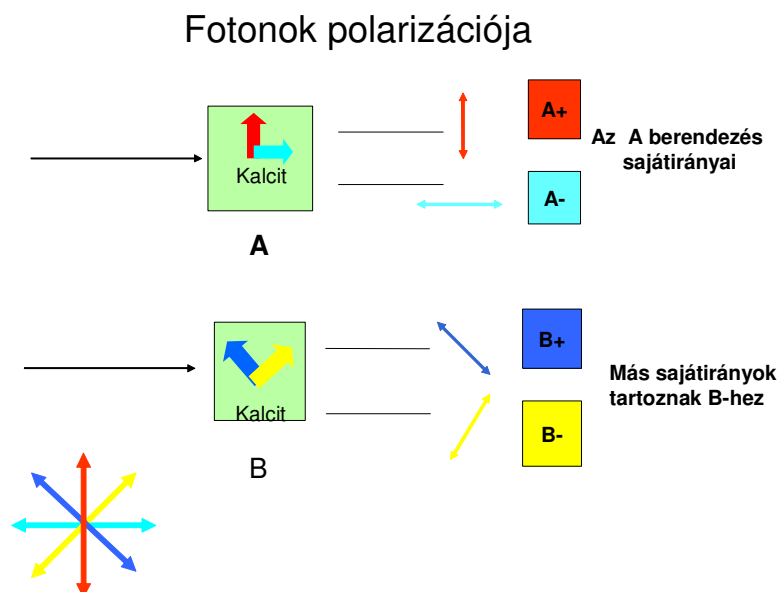
alakba és így az x irányú amplitúdó $\cos \theta$ arányban lesz kisebb, mint a bejövő amplitúdó, míg az y irányú $\sin \theta$ arányban. Mivel a fény intenzitása (Poynting vektorának nagysága) az amplitúdó négyzetével arányos a megfelelő intenzitások

$$I_x = I_0 \cos^2 \theta \quad \text{illetve} \quad I_y = I_0 \sin^2 \theta. \quad (2.2)$$

ahol I_0 a bejövő intenzitás. Gyöngítsük azonban most I_0 -t. A szemmel való észlelés helyett érzékeny detektorokat helyezünk a két nyaláb útjába, amelyek pl. kattanással jelzik, ha egy fotont nyeltek el. Elegendően gyöngé intenzitás esetén, amikor már csak egyszerre egy foton lehet a berendezésben, azt tapasztaljuk, hogy vagy az egyik, vagy a másik detektor kattán, 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

$$\frac{N_x}{N} = \cos^2 \theta \quad \frac{N_y}{N} = \sin^2 \theta \quad (2.3)$$

Nagyszámú részecske esetén ezek az arányok úgy interpretálhatók, mint detektálási valószínűségek összhangban a fenti 2.2 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 Fontos dolog az, hogy a sajátirányok függenek a kalcit helyzetétől. Ha a kristályt a bejövő fénysugár mint etengely körül elfordítjuk, akkor a sajátirányok mások lesznek, de a két sajátirány mindig merőleges lesz egymásra, pl. olyan, hogy az előző x tengellyel $+45^\circ$ -ot



2. ábra. Az A és a B kalcit mindegyikének két egymásra merőleges sajátiránya van, de ezek különböznek a két berendezés esetén.

illetve -45^0 -ot fog bezárni amint azt a 2 ábra mutatja.

Az 2.1 képletben szereplő szögfüggvények kifejezhetők mint a megfelelő egységvektorok belső vagy skaláris szorzata $\cos \theta = \langle \hat{x} | \hat{e}_\theta \rangle$, $\sin \theta = \langle \hat{y} | \hat{e}_\theta \rangle$. Ennek alapján

$$\hat{e}_\theta = \hat{x} \cos \theta + \hat{y} \sin \theta = \hat{x} \langle \hat{x} | \hat{e}_\theta \rangle + \hat{y} \langle \hat{y} | \hat{e}_\theta \rangle \quad (2.4)$$

írható. Összevetve ezt 2.3-al azt látjuk, hogy egyetlen fotonra vonatkoztatva a jelenséget úgy lehet magyarázni, hogy a detektálási valószínűségeket a belső szorzatok négyzetével azonosítjuk:

$$P_x = \cos^2 \theta = |\langle \hat{x} | \hat{e}_\theta \rangle|^2, \quad P_y = \sin^2 \theta = |\langle \hat{y} | \hat{e}_\theta \rangle|^2. \quad (2.5)$$

2.3. A valószínűségi amplitúdó fogalma

Tekintsük az előző kísérletet, a polarizátoron átmenő nyaláb átmegy egy kalcit kristályon, majd utána újra egyesülnek. Engedjük át az egyesített nyalábot egy olyan polarizátoron, amely csak \hat{e}' irányba enged át. Ha \hat{e}' merőleges \hat{e} -re, akkor az

előbbi elgondolás szerint, a fény ismét mint $\hat{x} \cos \theta + \hat{y} \sin \theta$ irányban rezgő vektor módjára egyesül, s ez alapján azt várjuk, hogy az utóbbi \hat{e}' -s polarizátoron már nem megy át semmi, mert $\langle \hat{e}' | \hat{e} \rangle = 0$

Ha viszont a fotonokat mint klasszikus részecskéket képzeljük el, akkor a következőképpen kellene eljárnunk. A részecske átmege az első berendezésen és utána ha az x irányban polarizált akkor ez $|\langle \hat{x} | \hat{e}_\theta \rangle|^2 = \cos^2 \theta$ valószínűséggel történik, majd 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 átmege 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 irányba 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:

$$P(e' \leftarrow e) = |\langle \hat{e}' | \hat{x} \rangle \langle \hat{x} | \hat{e}_\theta \rangle + \langle \hat{e}' | \hat{y} \rangle \langle \hat{y} | \hat{e}_\theta \rangle|^2 \quad (2.6)$$

Konklúzió: Minden $e \rightarrow e'$ -höz hozzárendelünk egy úgynevezett valószínűségi amplitúdót: $c(e' \leftarrow e) = \langle e' | e \rangle$, ez egy szám, amely általában véve komplex, és ha a részecske több külön úton is mehet, akkor az egymás után következő lehetőségek amplitúdóit össze kell szorozni, illetve ha ez töb úton is történhet, akkor a megfelelő amplitúdókat össze kell adni és a végén négyzetre emelni, ez adja a valószínűséget. Azzal nem szabad a valószínűségeket összeadni, hanem a megfelelő amplitúdókat kell összeadni és a végén négyzetre emelni.

Létezik olyan kristály, amely a ráeső síkhullámot két, ellentétes értelmű cirkulárisan poláros nyalábra bontja $+$ és $-$, az amplitúdó bármilyen lineárisan poláros beeső irányban. Ennek alapján ki lehet deríteni, hogy az amplitúdók komplex számok.

A Stern Gerlach berendezésre visszatérve, ezüst atomok esetén két kimenet volt, de ugyanez a helyzet Na, K atomok esetén is. Hasonló jelenséget tapasztaltak más atomok nyalábjainál is, azzal a különbséggel, hogy több kimenő csatorna is lehetséges. Pl. higany (Hg) esetén ez 1, vanádium esetén 4, mangán (Mn) esetén 6, vas (Fe) esetén 9. Azok a kérdéses atomok sajátimpulzusmomentumával, spinjével

van kapcsolatban és a magyarázatot később látni fogjuk.

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

$$P(u_k \leftarrow \psi) = |\langle u_k | \psi \rangle|^2 = |c_k|^2. \quad (2.7)$$

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

$$\sum |\langle u_k | \psi \rangle|^2 = \sum |c_k|^2 = 1 \quad (2.8)$$

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:

$$|\langle u_k | u_k \rangle| = 1, \quad (2.9)$$

$$\langle u_k | u_l \rangle = 0, \quad \text{ha } k \neq l. \quad (2.10)$$

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: $\langle u_k | u_k \rangle = 1$.

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

$$\sum_i \langle u_k | v_i \rangle \langle v_i | \psi \rangle \quad (2.11)$$

összeggel kell kiszámítani.

3. Young kísérlet, De-Broglie hullámok, szabad részecske Schrödinger egyenlete

Ebben a szakaszban a részecske térbeli helyzetének jellemzésével foglalkozunk. Egy alapvető kísérlet ezzel kapcsolatban amit Thomas Young végzett el először fényvel 1803-ban. Egy fényforrással szemben egy ernyőn két nyílás van amelyeken keresztül a fény egy további ernyőre jut, ahol interferenciakép keletkezik. Ez a kísérlet fontos bizonyítéka volt annak a hipotézisnek, hogy a fény hullámtermészetű. Ugyanilyen kísérletet azonban el lehet végezni véges tömegű részecskével pl. elektronokkal, sőt annál jóval nagyobb atomokkal, még molekulákkal is, és az interferenciakép szintén kialakul. Részletesebben megnézve azonban a kép kialakulását az derül ki, hogy a kép egyedi, lényegében pontszerű becsapódások összességéként alakul ki, amint az a 3 ábráson látható, nem úgy mint pl. vízhullámoknál.

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

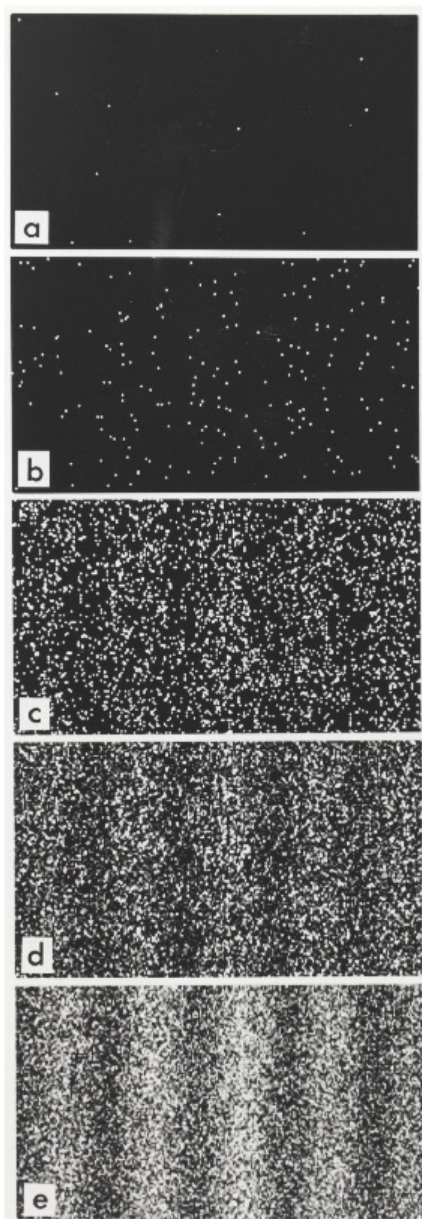
$$\langle x|\psi \rangle = \psi(x) \quad (3.1)$$

amely a ψ állapot jellemzésére használható. A 3 ábrán látható interferenciakép a következőképpen magyarázható. Az eredetileg ψ állapotban lévő részecske beérkezhet az első réshez az 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 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, azaz:

$$\langle x|\psi \rangle = \langle x|\varphi_1 \rangle \langle \varphi_1|\psi \rangle + \langle x|\varphi_2 \rangle \langle \varphi_2|\psi \rangle \quad (3.2)$$

$$\psi(x) = \varphi_1(x) \langle \varphi_1|\psi \rangle + \varphi_2(x) \langle \varphi_2|\psi \rangle = c_1 \varphi_1(x) + c_2 \varphi_2(x) \quad (3.3)$$

ahol $c_1 = \langle \varphi_1|\psi \rangle$, $c_2 = \langle \varphi_2|\psi \rangle$. A részecske megtalálási valószínűsége az ernyőn



3. 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.

$\rho(x) = |\psi(x)|^2$, és a szuperpozíció miatt a két lehetőség interferenciája lép föl: a négyzetreemelés után:

$$|\psi(x)|^2 = |c_1\varphi_1(x)|^2 + |c_2\varphi_2(x)|^2 + 2 \operatorname{Re} c_1^* c_2 \varphi_1^*(x) \varphi_2(x). \quad (3.4)$$

Az utolsó tag miatt föllép az interferencia, 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, hanem csak egy általános kijelentést teszünk arra nézve, hogy milyen lehet egyáltalán egy ilyen függvény.

Milyen lehet tehát egy konkrét esetben a $\psi(x)$? Akármi is lehet, csak annyi van előírva, hogy legyen négyzetesen integrálható, és a teljes x tengely mentén vett integrál legyen 1

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (3.5)$$

mert a részecske valahová biztosan érkezik az x -tengely mentén. Azt mondjuk ilyenkor, hogy a függvényünk 1-re normált.

Ilyen függvény pl. a $\psi(x) = \mathcal{N}e^{-x^2/4\sigma^2}$, ahol \mathcal{N} egy úgynevezett normálási tényező, amelyet úgy kell megválasztani, hogy a négyzetintegrál 1 legyen. Ezt a követelményünket a későbbiekben majd még finomítjuk.

Egy fontos esetet javasolt de Broglie, legyen egy adott p impulzusú részecske esetén $\Psi_p(x, t) = Ce^{i(kx - \omega t)}$, ahol $k = p/\hbar$, $\omega = E/\hbar$, ahol egy m tömegű nemrelativisztikus részecske esetén $E = p^2/2m$. Megjegyezzük, hogy ebből az következik, hogy most $\omega \neq kc$, hanem $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$. Ennek alapján a de Broglie hullám alakja másképpen:

$$\Psi_p(x, t) = Ce^{i(px/\hbar - Et/\hbar)} \quad (3.6)$$

Mélyebben is meg lehet alapozni, hogy egy p impulzusú állapot amplitúdója éppen a fönti $\Psi_p(x, t)$, de ezt most nem tesszük. Komoly hátrány, hogy ez nem négyzetesen integrálható.

Schrödinger olyan differenciálegyenletet keresett, amelynek ez megoldása, továbbá olyat, amely időben elsőrendű. Állítás: $\Psi_p(x, t)$ eleget tesz a következő egyenletnek:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_p}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_p}{\partial x^2} \quad (3.7)$$

Bizonyítás:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_p}{\partial t} = E \Psi_p, \quad \frac{\partial \Psi_p}{\partial x} = \frac{ip}{\hbar} \Psi_p, \quad \frac{\partial^2 \Psi_p}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi_p, \quad (3.8)$$

a 3.7 egyenlet tehát fennáll, ha figyelembe vesszük, hogy $E = p^2/2m$. Fölvívjuk már itt a figyelmet arra, hogy a középső képlet szerint, a de Broglie hullám esetén

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi_p}{\partial x} = p \Psi_p \quad (3.9)$$

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 $v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ikx}$, ahol C -t szokásosan $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ nak választottuk. A választás okát később látjuk majd.

Ám mostantól ne a de Broglie hullám alakját tekintjük alapvetőnek, hanem magát a 3.7 egyenletet, és nézzük meg, hogy milyen egyéb megoldásai lehetnek az

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \quad (3.10)$$

egyenletnek, amelyet a szabad részecske Schrödinger egyenletének nevezünk. Ennek megoldása bármely

$$\sum C_j e^{i(p_j x - E_j t)/\hbar} \quad (3.11)$$

véges vagy végtelen szuperpozíció is, amelyre $E_j = p_j^2/2m$. Ez azonban már nem lehet meghatározott impulzusú állapot, mert láthatólag sok különböző p_j szerepel benne. Ugyanakkor a fönti diszkrét végtelen összeg sem négyzetesen integrálható. Viszont megoldás és négyzetesen integrálható lehet, ha folytonos összeget tekintünk, diszkrét C_j -k helyett egy megfelelő $C(p)$ valós változós függvénnyel:

$$\Psi = \int C(p) e^{i(px - Et)/\hbar} dp = \int C(p) e^{i(px - p^2 t/2m)/\hbar} dp \quad (3.12)$$

A $t = 0$ időpontban ez

$$\psi(x) = \int C(p) e^{ipx/\hbar} dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\psi}(p) e^{ipx/\hbar} dp \quad (3.13)$$

Integrálás itt a $(-\infty, \infty)$ - re történik, de azt mostantól nem írjuk ki. Ráismerünk, hogy a 3.13 formula éppen a $\tilde{\psi}(p)$ függvény Fourier transzformáltja. Az inverz transzformáció:

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx \quad (3.14)$$

A Parseval-Plancherel tétel szerint, ha

$$\int |\tilde{\psi}(p)|^2 dp = 1, \quad \text{akkor} \quad \int |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (3.15)$$

azaz ha a $\tilde{\psi}(p)$ normált, akkor a $\psi(x)$ is normált.

A Schrödinger egyenlet a hullámfüggvényre potenciálos térben a következő alakú:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi \quad (3.16)$$

Ennek háromdimenziós általánosítása:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(\mathbf{r})\Psi \quad (3.17)$$

4. Hilbert tér és lineáris operátorai, Dirac jelölés

Az előző szakaszban láttuk, a mikrorészecskék tulajdonságai magyarázhatók egy matematikai képpel, melyben a részecske állapotváltozásait komplex számokkal, valószínűségi amplitúdókkal, írjuk le. Ezeket egy ψ absztrakt állapotból egy másik φ állapotba való átmenethez rendeljük, és $\langle \varphi | \psi \rangle$ -vel jelöljük. Ennek abszolút érték négyzete mondja meg azt, hogy mekkora az átmenet valószínűsége. Azonban ha jobban meggondoljuk, a dolgot tulajdonképpen meg kell fordítanunk, egy állapot megadása éppen azáltal történhet, ha ezeket az amplitúdókat megadjuk, oly módon, hogy megmondjuk, hogy egy adott mérőberendezés esetén az egyes csatornába, vagy az egyes helyekre mekkora amplitúdóval jut a részecske. Az állapotról akkor lehet konkrétan beszélni, tehát éppen azáltal tudjuk jellemezni, hogy megmondjuk, mekkorák ezek az amplitúdók valamilyen kiválasztott mennyiség mérése szempontjából. Megjegyezzük még, hogy mivel egy részecske állapota szükségképpen megváltozik a mérés során, a konkrét méréshez az szükséges, hogy sok azonos módon preparált részecskével végezzünk mérést. Ha a részecskén semifajta mérést nem végeztünk, vagy nem minden lehetséges amplitúdóját ismerjük, az állapotot akkor is lehet alkalmas módon jellemezni, erről azonban itt egyelőre nem lesz szó.

Eme tapasztalatok alapján a kvantummechanika kialakulása után rövidesen ki-formálódott az a matematikai keret, amely alkalmas a mikrorészecskék tulajdonságainak tárgyalására, amely a Hilbert terek lineáris operátorainak elméletén alapul.

Ennek lényege, hogy a részecskék állapotait egy lineáris, belső szorzat struktúrával is ellátott vektortér elemeiként kell tekinteni, a jellemző fizikai mennyiségeknek pedig a téren értelmezett lineáris operátorok felelnek meg. Ezen megfeleltetés pontosabb részleteit a következőkben majd axiómaszerűen is ki fogjuk mondani, előbb azonban bevezetjük az állapotteret azaz a Hilbert tér fogalmát.

Jelölésünkben Dirac nyomán a vizsgálandó halmaz, a Hilbert tér elemeit a $|\psi\rangle, |\varphi\rangle, |\phi\rangle, |\chi\rangle$ módon fogjuk jelölni, amelyekre a közönséges háromdimenziós vektorokhoz nagyon hasonló tulajdonságok érvényesek, azaz ezeket össze lehet adni és komplex számmal szorozni, és ezek ismét a tér elemei lesznek. Másképpen szólva a tér elemein két művelet definiálható, a kommutatív és asszociatív összeadás és a számmal való szorzás, azaz $\psi + \varphi$ és $a\psi$ is a tér eleme, ahol a egy komplex szám. Az elemeket vektoroknak fogjuk nevezni. Mivel a szorzás komplex is lehet, ennyiben bonyolultabb a vizsgált tér a közönséges vektorok terénél.

Tetszőleges elemekre érvényes, hogy

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

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

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

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

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

$$(|\psi\rangle, |\varphi\rangle) \equiv \langle\psi|\varphi\rangle. \quad (4.1)$$

Ez a közönséges belső szorzattal majdnem azonos tulajdonságokkal rendelkezik.

A második tényezőben lineáris:

$$(|\psi\rangle, |\varphi\rangle + |\chi\rangle) = \langle\psi|\varphi\rangle + \langle\psi|\chi\rangle \quad \langle\psi|a\varphi\rangle = a\langle\psi|\varphi\rangle, \quad (4.2)$$

de a tényezők sorrendjének fölcserélésekor az eredmény a komplex konjugált szám

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^* \quad (4.3)$$

s emiatt

$$\langle a\psi|\varphi\rangle = a^* \langle\psi|\varphi\rangle. \quad (4.4)$$

4.3-ből következően $\langle\psi|\psi\rangle$ valós, és posztuláljuk, hogy

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0, \text{ és } \langle\psi|\psi\rangle = 0 \text{ akkor és csak akkor, ha } \psi = 0 \quad (4.5)$$

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

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

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

Föntebb már Dirac jelölését alkalmaztuk, Dirac matematikus kortársainak eredményeitől függetlenül lényegében maga is megfogalmazta ezeket a tulajdonságokat. A lineáris tér elemeire a belső szorzat fönt használt jelöléséből kiindulva, magukat a vektorokat is ellátta a zárójel felével, azaz a φ vektorra a $|\varphi\rangle$ jelölést vezette be,

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

$$\langle a\psi + b\varphi| = a^* \langle\psi| + b^* \langle\varphi| \quad (4.6)$$

Míg a matematikában a tér belső szorzat struktúráját egy külön tulajdonságként fogták föl, a Dirac jelölésben kezdettől fogva benne van ennek a struktúrának a jelenléte. Mindazonáltal ennek a jelölésmódnak, mint alább látni fogjuk, a formalizmus alkalmazásakor jelentős előnyei vannak.

Érvényes a Cauchy-Bunyakovszkij-Schwarz egyenlőtlenség:

$$|\langle\psi|\varphi\rangle| \leq |\psi| |\varphi| \quad (4.7)$$

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

$$\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{ha } i = j \\ 0 & \text{ha } i \neq j \end{cases} \quad (4.8)$$

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

4.1. Lineáris operátorok:

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

Egy a H-ból sajátmagába megvalósító $\varphi \rightarrow A\varphi = \psi$ leképezést lineáris

operátornak nevezünk, ha teljesül a következő két összefüggés:

$$A(\varphi + \chi) = A\varphi + A\chi, \text{ és } A(c\varphi) = cA\varphi \quad (4.9)$$

A linearitásból következik, hogy a 0 vektorhoz minden lineáris operátor a 0 vektort rendeli hozzá.

Pontosabban a $\varphi \rightarrow A\varphi = \psi$ leképezést, mely H valamely D_A részhalmazát (A értelmezési tartományát) H egy másik R_A részhalmazára képezi le lineáris operátornak nevezünk, ha minden $\varphi, \chi \in D_A$ elemre ha teljesülnek a 4.9 összefüggések. Két operátor egyenlő ha értelmezési tartományuk megegyezik, és minden φ -re $A\varphi = B\varphi$.

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

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

Operátorok összegét és számmal való szorzatát a következő formulák értelmezik:

$$(A + B) |\varphi\rangle = A |\varphi\rangle + B |\varphi\rangle \quad (4.10)$$

$$(cA) |\varphi\rangle = cA |\varphi\rangle \quad (4.11)$$

Az összeadás a linearitásból következően könnyen beláthatóan asszociatív $(A + B) + C = A + (B + C)$ és kommutatív: $A + B = B + A$. továbbá a szorzásra nézve disztributív. A hatását a $|\psi\rangle$ vektorra kétféleképpen is fogjuk írni: $A |\psi\rangle \equiv |A\psi\rangle$. Az I -vel jelölt egységoperátor hatása minden vektorra $I |\psi\rangle = |\psi\rangle$, a 0 operátort

pedig a $0|\psi\rangle = 0$ definiálja.

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

$$[A, B] := AB - BA \quad (4.12)$$

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

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

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

4.2. Reprezentációk, operátorok mátrixa

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

$$|\psi\rangle = \sum c_i |u_i\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i|\psi\rangle \quad (4.13)$$

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

$$\langle \psi|\varphi\rangle = \left\langle \sum c_i u_i \middle| \sum b_j u_j \right\rangle = \sum c_i^* b_j \quad (4.14)$$

A Dirac féle beszédmód itt a következő: alkalmazzuk a $|\varphi\rangle$ -re a $\langle \psi| = \sum c_i^* \langle u_i|$ bra vektort. A c_i^* sorvektor a $\langle \psi|$ bra reprezentációja az $|u_i\rangle$ bázisban. A c_i

és b_j kifejtési együtthatók egyenként függenek attól, hogy mi az a bázis amelyet használunk, de maga a $\sum c_i^* b_j$ skalárszorzat ettől független. Egy másik bázisban kiszámítva a belső szorzatot az eredmény ugyanaz a szám.

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

$$\sum_i |u_i\rangle \langle u_i| = I \quad (4.15)$$

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

$$A|u_i\rangle = |\phi_i\rangle = \sum_k a_{ki} |u_k\rangle \quad (4.16)$$

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

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i|\psi\rangle \quad (4.17)$$

vektorra:

$$A|\psi\rangle = \sum_i A|u_i\rangle \langle u_i|\psi\rangle = \sum_{i,k} a_{ki} |u_k\rangle \langle u_i|\psi\rangle. \quad (4.18)$$

Ezt az eredményt Dirac nyomán úgy szokás írni, hogy

$$A = \sum_{i,k} a_{ki} |u_k\rangle \langle u_i| \quad (4.19)$$

Az $|u_k\rangle \langle u_i|$ mennyiségeket, amelyek a fentiek szerint maguk is lineáris operátorok a bázisvektorok külső szorzatának (diádjának) is szokás nevezni. Látható, hogy ebben a belső szorzat struktúrával rendelkező térben minden lineáris operátor egy bázis vektoraiból alkotott összes lehetséges diád valamilyen lineáris kombinációjaként írható föl. Az a_{ki} számokat az A operátor mátrixelemeinek nevezzük az $|u_i\rangle$ ortonormált bázisban, és ezeket explicit módon meghatározhatjuk az $A|u_i\rangle = \sum_k a_{ki} |u_k\rangle$ (4.16) összefüggés alapján. Az utóbbit skalárisan szorozva $\langle u_j|$ -vel és a bázis ortonormáltságát fölhasználva ugyanis azt kapjuk, hogy $a_{ji} = \langle u_j| Au_i\rangle \equiv$

$\langle u_j | A | u_i \rangle$, azaz az 4.19-ban szereplő mátrixelemek közvetlenül kiszámíthatók az

$$a_{ki} = \langle u_k | A u_i \rangle \equiv \langle u_k | A | u_i \rangle \quad (4.20)$$

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

$$|\varphi\rangle = A|\psi\rangle \Rightarrow b_k = \sum_i a_{ki} c_i \quad (4.21)$$

Egyszerűen látható, hogy operátorok összegének mátrixa a megfelelő mátrixok összege, egy számmal szorzott operátor mátrixa a mátrix számszorosa. Két operátor szorzatának mátrixa a megfelelő mátrixok szorzatával egyezik meg. (Bizonyítsuk be!)

Adjungált operátor. Minden A lineáris operátorhoz hozzárendelhető egy másik A^+ operátor a következőképpen. Írjuk elő, hogy tetszőleges φ és ψ esetén álljon fenn a

$$\langle \varphi | A \psi \rangle = \langle A^+ \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | A^+ \varphi \rangle^* \quad (4.22)$$

összefüggés. Az A^+ operátort A adjungáltjának nevezzük. A (4.22) követelmény az A^+ operátort egyértelműen meghatározza. Valóban, kiszámítva A^+ mátrixát a (4.22) összefüggés alapján :

$$\langle u_k | A^+ u_i \rangle = \langle u_i | A u_k \rangle^* = a_{ik}^* \quad (4.23)$$

tehát az A mátrixából az A^+ mátrixa is kiszámítható. Így mivel A^+ hatása egy ortonormált bázison meg van határozva, következésképpen A^+ minden vektoron meg van határozva, és alakja a 4.19 és 4.20 alapján a Dirac féle jelölés szerint: $A^+ = \sum_{i,k} a_{ik}^* |u_k\rangle \langle u_i|$. Megcserélve itt az összegzési indexeket látható, hogy

$$A^+ = \sum_{i,k} a_{ki}^* |u_i\rangle \langle u_k| \quad (4.24)$$

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

$$(AB)^+ = B^+A^+ \quad (4.25)$$

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

4.3. Bázisváltás, más kifejtési együtthatók.

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

Definíció: Unitérnek nevezzük az operátort, ha $U^+U = UU^+ = I$. Az unitér operátorok megőrzik a skaláris szorzatot, tetszőleges $|\psi\rangle, |\varphi\rangle$ esetén $(U|\varphi\rangle, U|\psi\rangle) = (U\varphi|U\psi) = \langle\varphi|U^+U\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle$

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

$$|\chi_k\rangle = \sum u_{ik} |\phi_i\rangle. \quad (4.26)$$

Ekkor $|\psi\rangle = \sum b_k |\chi_k\rangle = \sum_i \sum_k u_{ik} b_k |\phi_i\rangle$. Ezt szorozva $\langle\phi_i|$ -vel, vagy arra hivatkozva, hogy a kifejtési együtthatók egyértelműek $c_i = \sum u_{ik} b_k$. A 4.26 alapján $u_{jk} = \langle\phi_j|\chi_k\rangle$. Ezeket a mennyiségeket úgy tekinthetjük mint az

$$U = \sum_i |\chi_i\rangle\langle\phi_i| \quad (4.27)$$

operátor mátrixelemeit akár a $|\chi_k\rangle$ akár a $|\phi_k\rangle$ bázisban. Mivel $U^+ = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\chi_i|$, egyszerűen látható, hogy U unitér, azaz $U^+U = UU^+ = I$.

4.4. Projekciós operátor

Legyen \mathcal{M} altér. Azoknak a vektoroknak a halmazát, amelyek minden \mathcal{M} -beli vektorra ortogonálisak az \mathcal{M} ortogonális komplementerének nevezzük és \mathcal{M}^\perp -el jelöljük. Egyszerűen látható, hogy \mathcal{M}^\perp is altér, azaz két \mathcal{M}^\perp -beli vektor összege és egy ilyen vektor számszorosa is merőleges \mathcal{M} -re. Legyen $|\varphi_i\rangle$, $i = 1, 2, \dots$ bázis az altérben. Tekintsünk egy $|\psi\rangle$ vektort \mathcal{H} -ban és a $|\psi_M\rangle = \sum |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle$ vektort amely nyilvánvalóan \mathcal{M} -ben van. Ezt a ψ_M -et a ψ merőleges vetületének nevezzük az \mathcal{M} altérre. Tekintsük most a $\psi_{M^\perp} = \psi - \psi_M = \psi - \sum |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle$ vektort. Ezt megszorozva skalárisan bármely $\langle\varphi_k|$ -val 0-t kapunk. Ezért ugyancsak 0-t kapunk, ha $\langle\varphi_k|$ bármely lineáris kombinációjával szorzunk, ami azt jelenti, hogy ψ_{M^\perp} ortogonális \mathcal{M} -re, azaz \mathcal{M}^\perp -ben van. Másképpen tehát $\psi = \psi_{M^\perp} + \psi_M$, azaz a ψ -t fölbontottuk, az \mathcal{M} -be és ortogonális komplementerébe tartozó elemekre. Ez a fölbontás értelmű. Ha ugyanis $\psi = \psi_{M^\perp} + \psi_M = \psi'_{M^\perp} + \psi'_M$ lenne, akkor átrendezés után a $\psi_M - \psi'_M = \psi'_{M^\perp} - \psi_{M^\perp} = \psi_0$ mind \mathcal{M} -ben mind a rá ortogonális \mathcal{M}^\perp -ben benne van, tehát $\langle\psi_0|\psi_0\rangle = 0$, azaz ψ_0 a zéró vektor, amiből következik, hogy a fölbontás értelmű. A

$$\psi_M = \sum |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle \quad (4.28)$$

összefüggést Dirac nyomán úgy tekinthetjük mint az

$$E_M = \sum |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \quad (4.29)$$

operátor hatását a ψ vektorra, amely az $E_M|\psi\rangle = \psi_M$ összefüggés alapján előállítja a vetületet. Ezért az E_M operátort *projekciós operátornak* nevezzük. Ez láthatólag önadjungált és egyszerűen megmutathatóan idempotens, azaz $(E_M)^2 = E_M$. Ha $\mathcal{M} = \mathcal{H}$ a teljes tér, akkor a megfelelő $E_{\mathcal{H}} = 1$ az egységoperátor. Ha viszont az összegben csak egy tag van, akkor az $E_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ a $|\varphi\rangle$ vektor által generált egydimenziós altérre vetítő projekciós operátor. Az is megmutatható, hogy fordítva, minden önadjungált és idempotens operátor projekció.

5. Önadjungált operátorok spektrális előállítása

Egy kvantumos kísérlet során az egyes mérési eredmények azt mutatják, hogy a bejövő állapot átalakul egy másik állapottá, amely a mérőberendezésre jellemző valamilyen állapot, amelyet korábban sajátállapotnak nevezünk. Egy részecskén

végzett kísérlet során az állapot mindig valamelyik sajátállapotba megy át, de hogy melyikbe azt nem tudjuk. Egy mérés eredménye tehát $|\psi\rangle \rightarrow |u_i\rangle$, amit az $|u_i\rangle\langle u_i|$ projekció $|\psi\rangle \rightarrow |u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle$ hatásával írhatunk le, amely együtthatóként magában foglalja annak az $\langle u_i|\varphi\rangle$ amplitúdóját is hogy éppen az $|u_i\rangle$ állapotba jut a részecske.

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

$$A = \sum \alpha_i |u_i\rangle\langle u_i| \quad (5.1)$$

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

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

$$A |u_k\rangle = \sum \alpha_i |u_i\rangle\langle u_i|u_k\rangle = \alpha_k |u_k\rangle \quad (5.2)$$

azaz

$$A |u_k\rangle = \alpha_k |u_k\rangle \quad (5.3)$$

az eredmény. Ebben a bázisban egyszerűen láthatóan az A operátor mátrixa diagonális, és ha a mért α_i értékek valósak, akkor (4.24) és (4.19) alapján látható, hogy az operátor önadjungált.

Általában azonban közvetlenül nem tudjuk, hogy melyik a sajátállapotok bázisa, mert az operátor nem a fönti alakban hanem rendszerint egy másik bázisban van megadva. Alapvető feladat tehát, hogy megkeressük azokat az állapotokat, amelyek egy önadjungált operátor sajátállapotai, és megadjuk azt is, hogy mekkorák a megfelelő sajátértékek. Ha ezt tudjuk, akkor meg tudjuk mondani, hogy mekkorák lesznek az egy tetszőleges bejövő állapothoz tartozó kimenő amplitúdók: a

sajátvektorok komponensei egy választott bázisban, és ezekhez milyen számszerű eredmények tartoznak: a megfelelő sajátértékek. Pl. egy z irányú Stern Gerlachból kijövő $+z$ állapotot egy x irányúba vagy egy tetszőleges irányúba engedve milyen amplitúdókkal kerül az egyes állapotokba. Vagy azt, hogy energiamérés után milyen amplitúdóval kerül egy részecske a tér egy adott helyére.

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

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

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

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

Tétel: Véges dimenziós térben minden A lineáris operátornak van legalább egy sajátvektora.

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

$$\langle v_j|A|\varphi\rangle = \sum_i \langle v_j|A|v_i\rangle c_i = \langle v_j|\lambda|\varphi\rangle = \lambda c_j \quad (5.4)$$

$$\text{azaz} \quad \sum_i (a_{ji} - \lambda \delta_{ji}) c_j = 0 \quad (5.5)$$

annak szükséges és elegendő feltétele, hogy a fenti homogén és lineáris egyenletrendszernek az ismeretlen c_j számokra nemtriviális (nem csupa 0) megoldása

legyen az, hogy az egyenlet mátrixának determinánsa tűnjön el:

$$\det |a_{ji} - \lambda \delta_{ji}| = 0 \quad (5.6)$$

A determináns a λ -ban egy n -ed fokú polinom lesz, amelynek mindig van legalább egy gyöke a komplex számok körében. Megkeresve ezt a λ_0 gyököt, majd megoldva az egyenletet a λ_0 -nak megfelelő c_i^0 számokra megkapjuk a $|\varphi\rangle$ sajátvektort mint a $|v_i\rangle$ bázisvektorok lineáris kombinációját. Itt még nem használtuk ki, hogy A önadjungált. A fenti 5.5 egyenlet neve karakterisztikus vagy szekuláris egyenlet.

Most rátérünk az önadjungált operátorokra.

Tétel: Önadjungált operátor sajátértékei valósak:

Bizonyítás:

$$A|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle, \quad \lambda\langle\varphi|\varphi\rangle = \langle\varphi|A\varphi\rangle = \langle A\varphi|\varphi\rangle = \lambda^*\langle\varphi|\varphi\rangle \quad (5.7)$$

$$\Rightarrow (\lambda - \lambda^*)\langle\varphi|\varphi\rangle = 0 \Rightarrow \lambda = \lambda^*, \quad \text{mert } \langle\varphi|\varphi\rangle \neq 0 \quad (5.8)$$

Tétel: Önadjungált operátor különböző sajátértékeihez tartozó sajátvektorok ortogonálisak:

$$A|\varphi_1\rangle = \lambda_1|\varphi_1\rangle, \quad A|\varphi_2\rangle = \lambda_2|\varphi_2\rangle, \quad \lambda_1 \neq \lambda_2 \quad \text{valósak} \quad (5.9)$$

$$\begin{aligned} \langle\varphi_2|A\varphi_1\rangle &= \lambda_1\langle\varphi_2|\varphi_1\rangle = \langle A\varphi_2|\varphi_1\rangle = \lambda_2\langle\varphi_2|\varphi_1\rangle \\ &\Rightarrow (\lambda_1 - \lambda_2)\langle\varphi_2|\varphi_1\rangle = 0 \Rightarrow \langle\varphi_2|\varphi_1\rangle = 0 \end{aligned} \quad (5.10)$$

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

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

Bizonyítás: Az előzőek szerint mindig van legalább egy sajátvektor $|u_1\rangle$, és legyen $A|u_1\rangle = \alpha_1|u_1\rangle$. Az $|u_1\rangle$ -re merőleges vektorok egy $n - 1$ dimenziós \mathcal{H}_1 alteret alkotnak. Megmutatjuk, hogy \mathcal{H}_1 invariáns altere A -nak. Legyen $\psi \in \mathcal{H}_1$, azaz $\langle\psi|u_1\rangle = 0$, akkor $\langle A\psi|u_1\rangle = \langle\psi|Au_1\rangle = \alpha_1\langle\psi|u_1\rangle = 0$, azaz $A\psi$ is merőleges $|u_1\rangle$ -re azaz benne van \mathcal{H}_1 -ben, tehát \mathcal{H}_1 invariáns altere A -nak. Tekinthejtük emi-

att A -t a \mathcal{H}_1 -ben. Itt ismét létezik legalább egy sajátvektor $|u_2\rangle$. Tekintsük most \mathcal{H}_1 azon \mathcal{H}_2 alterét amely az u_2 -re merőleges vektorokból áll. Mivel ez \mathcal{H}_1 altere az itteni vektorok $|u_1\rangle$ -re is merőlegesek lesznek. A fenti gondolatmenetet ismételve kapunk egy $|u_3\rangle$ sajátvektort, stb. Végül szükségképpen kapunk egy $|u_n\rangle$ sajátvektort, amely az összes előzőre merőleges. Ilyen módon páronként ortogonális $|u_i\rangle$ vektorok halmazát kapjuk. Mivel egy sajátvektor számszorosa ugyanahhoz a sajátértékhez tartozó sajátvektor, az $|u_i\rangle$ -k normálhatók is \square .

Az A önadjungált operátor mátrixa ebben az u_i bázisban az

$$a_{ik} = \langle u_i | Au_k \rangle = \alpha_k \langle u_i | u_k \rangle = \alpha_k \delta_{ik} \quad (5.11)$$

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

$$A = \sum_k \alpha_k |u_k\rangle \langle u_k| = \sum_k \alpha_k E_k \quad (5.12)$$

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

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

A sajátrepresentációban fölírt karakterisztikus polinomból látszik, hogy az α_k sajátérték a karakterisztikus polinom g_k -szoros gyöke.

Sajátrepresentációban, azaz abban a bázisban, amelyet az önadjungált operátor sajátvektoraiból áll. az operátor mátrixa diagonális és az átlóban éppen a sajátértékek állnak.

Feladatok:

1. Bizonyítsuk be, hogy egy A operátor képe és magja alterek a \mathcal{H} -ban, még hozzá az A invariáns alterei.

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

3. Mutassuk meg, hogy egy unitér operátor sajátértkei egységnyi abszolút értékű komplex számok.

4. Mutassuk meg, hogy egy projekciós operátor sajátértéke a 0 vagy 1 lehet.

5. Pozitívnak nevezünk egy A önadjungált operátort, ha tetszőleges $|\varphi\rangle$ -re $\langle\varphi|A|\varphi\rangle \geq 0$. Pozitív definit az operátor, ha $|\varphi\rangle \neq 0$ -ra $\langle\varphi|A|\varphi\rangle > 0$. Mutassuk meg, hogy A^+A tetszőleges A esetén pozitív önadjungált operátor.

6. Mutassuk meg, hogy unitér operátorok sajátértkei egységnyi abszolút értékű komplex számok.

7. Mutassuk meg, hogy véges dimenziós térben minden unitér operátor diagonalizálható, azaz létezik a tér dimenziószámával megegyező számú páronként ortogonális egységvektora

6. Fölcserélhető operátorok CSCO

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

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

$$AB|\varphi\rangle = BA|\varphi\rangle = B\alpha_1|\varphi\rangle = \alpha_1B|\varphi\rangle \quad (6.1)$$

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

(i) Ha α_1 nem degenerált, azaz a hozzátartozó invariáns altér egydimenziós, akkor két ugyanehhez az α -hoz tartozó sajátvektor csak egy konstansban különbözhet egymástól.

$$B|\varphi\rangle = \beta_1|\varphi\rangle \quad (6.2)$$

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

(ii) Ha α degenerált, akkor annyit mondhatunk, hogy minden az α_1 -hoz tartozó $|\varphi\rangle$ -vel együtt $B|\varphi\rangle$ is benne van A -nak az α -hoz tartozó invariáns alterében, más szóval ez az altér B -nek is invariáns altere. Emiatt megszoríthatjuk B -t erre az altérre, és lévén B önadjungált, létezik olyan egymásra páronként ortogonális vektorrendszer, amelyek B -nek sajátvektorai ebben az altérben. Mivel minden

ittlévő vektor A -nak is sajátvektora α sajátértékkel, a kapott vektorok A és B közös sajátvektorai.

Válasszunk ezek közül egyet, legyen ez $|u_1\rangle$. Ha α nem degenerált akkor $|u_1\rangle = |\varphi\rangle$ vagy annak egy számszorosa. Tekintsük ezek után az $|u_1\rangle$ -re ortogonális alteret. Ez a spektráltétel igazolásánál látott érvelés szerint mind A -nak mind B -nek invariáns altere. Tekinthetjük most már A -t és B -t ebben az invariáns altérben amelyben megint van A -nak valamilyen sajátvektora. és ezek közül megint lehet találni olyat, amely B -nek is sajátvektora. Folytatva az eljárást, a véges dimenziós térben végül elfogynak az ortogonális alterek.

CSCO (complete set of commuting operators) azaz fölcserélhető operátorok teljes rendszere: Az A, B, C, \dots operátorok halmazát *CSCO*-nak nevezzük,

(i) ha páronként fölcserélhető és

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

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

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

1. Mutassuk meg, hogy tetszőleges A operátor fölbontható egy $A = B + iC$ alakba, ahol A és B önadjungált operátorok.

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

3. A fölbontás nélkül, az önadjungált operátorokra vonatkozó spektráltétel gondolatmenetének alkalmas módosításával mutassuk meg, hogy minden normális operátor diagonalizálható.

4. Mutassuk meg, hogy ha létezik a tér dimenziószámával megegyező számú egymásra páronként sajátvektor, akkor az operátor szükségképpen normális.

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

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

7.1. Az L^2 tér definíciója

Az L^2 tér definíciója: a valamely intervallumon, amely lehet a $(-\infty, \infty)$ is, négyzetesen integrálható függvények tere. A belső szorzat értelmezése integrállal $\int \varphi^*(x)\psi(x)dx$, az adott intervallumra.

Meg lehet mutatni, hogy létezik diszkrét bázis: $u_k(x)$, $k = 1, 2, \dots$, alább példákat adunk erre. Ortogonalitás és normáltság:

$$\int u_k^*(x)u_{k'}(x)dx = \delta_{kk'} \quad (7.1)$$

Teljesség: tetszőleges $\psi(x)$ kifejehető az $u_k(x)$ -ek szerint.

$$\psi(x) = \sum_k c_k u_k(x), \quad (7.2)$$

amiből az $u_k(x)$ -ek ortonormáltsága miatt

$$c_k = \int u_k^*(x)\psi(x)dx \quad (7.3)$$

Ez utóbbi kettőből:

$$\psi(x) = \sum_k c_k u_k(x) = \sum_k \left(\int u_k^*(x')\psi(x')dx' \right) u_k(x) = \quad (7.4)$$

$$= \int \left(\sum_k u_k^*(x')u_k(x) \right) \psi(x')dx' \quad (7.5)$$

Ez minden $\psi(x)$ -re fennáll, tehát

$$\sum_k u_k^*(x')u_k(x) = \delta(x - x') \quad (7.6)$$

s ez utóbbit is szokták a teljesség kifejezésének tekinteni.

Példák:

1. Fourier rendszer a $-a/2, a/2$ intervallumon értelmezett periodikus függ-

vények terén:

$$\frac{1}{\sqrt{a}}, \quad \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{2\pi}{a} nx, \quad \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi}{a} nx, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (7.7)$$

vagy komplex változatban

$$\frac{1}{\sqrt{a}} e^{i \frac{2\pi}{a} nx}, \quad n = 0, 1.. \quad (7.8)$$

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

$$\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi}{L} nx \quad (7.9)$$

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

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = (3x^2 - 1)/2, \quad (7.10)$$

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

4. A Hermite függvények:

$$\mathcal{N}_n e^{-x^2/2} H_n(x) \quad (7.11)$$

a $-\infty, \infty$ intervallumon, ahol $H_n(x)$ -ek az úgynevezett Hermite féle polinomok, $1, 2x, 4x^2 - 2$, és \mathcal{N}_n -ek alkalmasan választott normálási tényezők.

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

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

Feladatok: 1. Mutassuk meg, hogy a paritás és a fönt bevezetett integrállal értelmezett belső szorzatra nézve önadjungált és unitér.

2. Mutassuk meg, hogy a valós változós komplex függvényt a változóval szorozva önadjungált operátort adtunk meg, a deriválás viszont nem önadjungált.

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

7.2.1. Síkhullámok

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

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} dp, \quad (7.12)$$

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

$$\tilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} dx \quad (7.13)$$

Jelöljük az itt szereplő de Broglie féle (nulla időpillanatban vett) síkhullámot a $v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$ -vel. Mint már volt szó róla a $|v_p(x)|^2 = \frac{1}{2\pi}$ függvény nem integrálható a teljes $(-\infty, \infty)$ intervallumon. A fenti 7.12 integrált úgy tekintjük mint egy kifejtést a $v_p(x)$ függvények szerint. Két ilyen bázisfüggvény skaláris szorzata a Dirac delta ismert tulajdonsága, Fourier előállítására alapján következő:

$$\int_{-\infty}^{\infty} v_p^*(x) v_{p'}(x) dx = \delta(p - p'). \quad (7.14)$$

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

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) v_p(x) dp \quad (7.15)$$

illetve a $\tilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} v_p^*(x) \psi(x) dx$ formában írjuk ezeket, akkor látható, hogy ezek hasonlóak az L^2 -beli diszkrét bázisok szerinti kifejtésekhez, és a teljesség a következőképpen írható: $\int_{-\infty}^{\infty} v_p(x') v_p^*(x) dx = \delta(x - x')$. A p folytonos paraméter által indexelt $v_p(x)$ függvények halmazát ezért *általánosított bázis*nak tekinthetjük, a bázis elemei a p paraméter értékében különböznek egymástól.

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

7.2.2. Delta függvények

Egy hasonló folytonos paraméterrel illetve paraméterekkel indexelhető általánosított bázist nyerhetünk, ha tekintjük a következő azonosságokat a háromdimenziós térben mozgó részecskét leíró hullámfüggvényekre vonatkozóan. Legyen $\psi(\mathbf{r})$ egy négyzetesen integrálható függvény, ekkor a $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ Dirac delta definíciója szerint, nyilvánvalóan fömáll, .

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\mathbf{r}_0) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) d^3\mathbf{r}_0 \quad (7.16)$$

$$\psi(\mathbf{r}_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) d^3\mathbf{r} \quad (7.17)$$

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_0) d^3\mathbf{r} = \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}'_0) \quad (7.18)$$

általánosított "ortogonalitási relációt" .

7.2.3. Egyéb általánosított bázisok.

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

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} c(\alpha) w_{\alpha}(\mathbf{r}) d\alpha. \quad (7.19)$$

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} w_\alpha^*(\mathbf{r})w_{\alpha'}(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \delta(\alpha - \alpha'). \quad (7.20)$$

8. A koordináta és az impulzus operátora, általánosított sajátvektorok

Ha az A fizikai mennyiség spektruma diszkrét és a lehetséges mérési kimenetek az α_i eredményeket adják, akkor az $A = \sum \alpha_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ operátornak megfelelő berendezésen való áthaladás (fizikai mennyiség mérése) során az egyes kimenetek valószínűségi amplitúdóit a $|\psi\rangle = \sum |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle$ kifejtésnek megfelelő $\langle\varphi_i|\psi\rangle$ számok adják. A fizikai mennyiségek között azonban a kvantumelméletben is vannak olyanok, amelyek folytonos értékeket vehetnek föl. Ilyen pl. a koordináta, amelyek most csak egyik derékszögű komponensét vizsgáljuk. Legyen ez x . Annak az amplitúdóját, hogy a ψ állapotban lévő részecskét az x_1 helyen találjuk a mérés után, $\langle x_1|\psi\rangle$ -vel jelöljük, és az összes lehetséges x esetén $\langle x|\psi\rangle$ -nek írva az x függvényének tekintünk, akkor egy ún. hullámfüggvényt kapunk. Dirac nyomán az $|x\rangle$ -et is szoktuk (általánosított) állapotnak nevezni, noha ez szigorúbb értelemben nem az, amint az alább kiviláglik. Föltételezésünk szerint ezek az $|x\rangle$ állapotok azt írják le, hogy a részecske az x helyen van, és mivel ezek az x -ek bármilyen valós számok lehetnek, az $|x\rangle$ állapotok kontinuum számosságúak, és föltételezzük, hogy általánosított értelemben ezek egy teljes rendszert alkotnak, azaz segítségével bármely állapot kifejezhető folytonos módon:

$$|\psi\rangle = \int |x\rangle\langle x|\psi\rangle dx \quad (8.1)$$

Az $A = \sum \alpha_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ analogonjára bevezetjük az X helykoordináta operátort, amelynek az általánosított spektrális előállítás

$$X = \int x|x\rangle\langle x| dx \quad (8.2)$$

alakú.

Ennek általánosított sajátvektorai az $|x\rangle$ -ek amelyekkel föltételezésünk szerint a $|\psi\rangle = \int |x\rangle\langle x|\psi\rangle dx$, összefüggés alapján minden közönséges állapot kifejezhető. Valóban, ha ezt balról formálisan megszorozzuk a $\langle x'|$ -vel, akkor az $\langle x'|\psi\rangle =$

$\int \langle x'|x \rangle \langle x|\psi \rangle dx$ összefüggést nyerjük vagyis a $\psi(x') = \int \langle x'|x \rangle \psi(x) dx$ integrális kapcsolatot. Látható, hogy ha kikötjük, hogy ez minden x' -re érvényes maradjon, akkor az $\langle x'|x \rangle$ belső szorzatra a $\delta(x - x')$ adódik, ami mutatja, hogy ezek a koordináta sajátállapotok a közönséges értelemben nem normálhatók.

A belső szorzatot ebben a reprezentációban a

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

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

$$\langle x|X|\psi \rangle = \int x' \langle x|x' \rangle \langle x'|\psi \rangle dx' = \int x' \delta(x - x') \psi(x') dx' = x\psi(x) \quad (8.4)$$

amit néha így is fogunk írni:

$$\hat{X}\psi(x) = x\psi(x) \quad (8.5)$$

Hasonlóan be lehet vezetni az impulzus sajátállapotokat is mint a

$$P = \int p|p \rangle \langle p| dp \quad (8.6)$$

operátor sajátállapotait. A

$$|\psi \rangle = \int |p \rangle \langle p|\psi \rangle dp = \int |p \rangle \tilde{\psi}(p) dp \quad (8.7)$$

kifejtésből:

$$\langle x|\psi \rangle = \int \langle x|p \rangle \langle p|\psi \rangle dp = \int \langle x|p \rangle \tilde{\psi}(p) dp \quad (8.8)$$

amiből:

$$\langle x|p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad (8.9)$$

Valóban, de Broglie nyomán, mint a történeti részből tudjuk, annak az amplitúdója, hogy egy p impulzusú részecskét az x helyen találunk az időtől függő $e^{-iEt/\hbar}$ fázis-szorító erejéig éppen a 8.9 által megadott képlet adja. Ebből következik, de a

$\langle p|\psi\rangle = \int \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle dx$ ből is látható, hogy

$$\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} \quad (8.10)$$

Eszerint a ψ állapot koordináta és impulzusreprezentációban vett alakja között a következő kapcsolat van.

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle = \int \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx. \quad (8.11)$$

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \int \langle x|p\rangle \langle p|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{ipx/\hbar} \tilde{\psi}(p) dp. \quad (8.12)$$

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

Az impulzus operátora koordinátareprezentációban:

$$\begin{aligned} \langle x|P|\psi\rangle &= \int \langle x|P|p\rangle \langle p|\psi\rangle dp = \int p e^{ipx/\hbar} \tilde{\psi}(p) dp = \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \tilde{\psi}(p) dp = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) =: \hat{P}\psi(x) \end{aligned} \quad (8.13)$$

Általában háromdimenziós esetben:

$$\langle \mathbf{r}|P|\psi\rangle = -i\hbar \nabla \psi(\mathbf{r}) \quad (8.14)$$

Egyszerűen bizonyíthatóan X és P önadjungált operátorok.

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

$$\hat{X}\psi_a(x) = x\psi_a(x) = a\psi_a(x) \quad (8.15)$$

minden x -re:

$$(x - a)\psi_a(x) = 0 \quad (8.16)$$

Ez minden x -re csak úgy állhat fenn, ha miatt $\psi_a(x) = 0$ mindenhol ahol $x \neq a$, és nem föltétlenül 0, ahol $x = a$. Ha ott is nulla lenne, akkor $\psi_a(x)$ azonosan mindenütt 0 lenne, ezért előírjuk, hogy az $x = a$ -ban nem 0 hanem legyen ott az $\psi_a(x) = \langle x|a\rangle = \delta(x - a)$ nak megfelelő "függvény", s így 8.16 mindenhol fennáll.

Az impulzus esetén a

$$\hat{P}\psi_p(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi_p(x) = p\psi_p(x) \quad (8.17)$$

egyenlet megoldása

$$\psi_p(x) = Ce^{ipx/\hbar} \quad (8.18)$$

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

8.1. X és P nem fölcserélhető:

X, Y, Z egymás közt fölcserélhető, hasonlóan P_x, P_y, P_z . Vizsgáljuk $(XP - PX)|\psi\rangle$ -t koordináta reprezentációban. Legyen $|\chi\rangle := P|\psi\rangle$ és $|\phi\rangle := X|\psi\rangle$, ekkor

$$\langle \mathbf{r} | \chi \rangle \equiv \chi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | P | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (8.19)$$

$$\langle \mathbf{r} | \phi \rangle \equiv \phi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | X | \psi \rangle = x\psi(\mathbf{r}) \quad (8.20)$$

így

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | (XP - PX) | \psi \rangle &= \langle \mathbf{r} | XP | \psi \rangle - \langle \mathbf{r} | PX | \psi \rangle = \langle \mathbf{r} | X | \chi \rangle - \langle \mathbf{r} | P | \phi \rangle = \\ &= x\chi(r) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \phi}{\partial x} = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x\psi(r)) = \\ &= \psi(r) = i\hbar \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \end{aligned} \quad (8.21)$$

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

$$XP - PX \equiv [X, P] = i\hbar \quad (8.22)$$

Feladat: Adjuk meg X -et p reprezentációban.

9. A kvantummechanika posztulátumai

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

Ebben benne van a szuperpozíció elve, hiszen a vektorok lineáris kombinációi is vektorok, tehát ezek is a fizikai rendszer lehetséges állapotai. A tiszta jelző arra utal, hogy állapot szó azt jelenti, hogy a rendszerről lehetséges legtöbb információ

a rendelkezésünkre áll, azt már preparáltuk. A 2. szakaszban tárgyalt példa esetén pl. a foton már áthaladt egy polarizátoron és tudjuk, hogy ez után milyen a polarizációs állapota. Egy természetes, polarizálatlan forrásból érkező fotonok állapotáról nem tudunk mit mondani, azok polarizálatlanok, s így egy ilyen foton nincs tiszta állapotban, állapotát keveréknek nevezzük. A tiszta állapot elemzésére alább még visszatérünk, a keverék állapotok matematikai jellemzésére itt nem foglalkozunk.

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

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

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

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

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

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

$$\mathcal{P}(\alpha_n) = \langle\psi|E_n|\psi\rangle, \quad (9.1)$$

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

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

$$\mathcal{P}(\alpha_1 < \alpha < \alpha_2) = \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \langle\psi|E_\alpha|\psi\rangle d\alpha, \quad (9.2)$$

ahol E_α az α általánosított sajátértékhez tartozó projekció.

A fenti kijelentéseket egy kissé másképpen is megfogalmazhatjuk Tekintsük először a diszkrét spektrum esetét. Ha $|u_n^i\rangle$ az α_n sajátértékhez tartozó sajátalter egy ortonormált bázisa, azaz $A|u_n^i\rangle = \alpha_n|u_n^i\rangle$ $i=1, 2, \dots, g_n$ azaz az α_n sajátérték

g_n -szeresen degenerált, akkor $E_n = \sum_i^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i|$ s így 9.1 szerint

$$\mathcal{P}(\alpha_n) = \langle \psi | E_n | \psi \rangle = \sum_i^{g_n} \langle \psi | u_n^i \rangle \langle u_n^i | \psi \rangle = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2. \quad (9.3)$$

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

$$\mathcal{P}(\alpha_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2. \quad (9.4)$$

Az eredmény független az $|u_n^i\rangle$ bázis konkrét választásától, hiszen a 4.4 alpontban láttuk, hogy a projekció egyértelmű. A valószínűséget szemléletesen úgy kapjuk, hogy a $|\psi\rangle$ vektort levetítjük az E-nek megfelelő síkra, majd a vetület hosszának négyzetét vesszük.

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

$$\mathcal{P}(\alpha_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2 = |c_n|^2, \quad (9.5)$$

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

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

$$\mathcal{P}(\alpha_1 < \alpha < \alpha_2) = \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \int_{\beta} |\langle w_\alpha^\beta | \psi \rangle|^2 d\beta d\alpha \quad (9.6)$$

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

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

$$|\psi'\rangle = E_n |\psi\rangle / \sqrt{\langle \psi | E_n | \psi \rangle} \quad (9.7)$$

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

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

$$|\psi'\rangle = E_{\Delta\alpha} |\psi\rangle / \sqrt{\langle\psi|E_{\Delta\alpha}|\psi\rangle}, \quad (9.8)$$

ahol

$$E_{\Delta\alpha} = \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} |w_\alpha^\beta\rangle \langle w_\alpha^\beta| d\alpha d\beta \quad (9.9)$$

és (9.6)-höz hasonlóan egy folytonos degenerációt is föltételeztünk. Ezt a posztulátumot szokás redukciós posztulátumnak nevezni.

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

$$|\psi'\rangle = E_n |\psi\rangle / \sqrt{\langle\psi|E_n|\psi\rangle} = |u_n\rangle \langle u_n|\psi\rangle / \sqrt{\langle\psi|u_n\rangle \langle u_n|\psi\rangle} = |u_n\rangle \frac{\langle u_n|\psi\rangle}{|\langle u_n|\psi\rangle|}. \quad (9.10)$$

Ha ha α_n degenerált, akkor $E_n = \sum_i^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i|$. s így a mérés után az állapot: $\sum_i^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle / \sqrt{\sum |c_n^i|^2}$, ahol a $c_n^i = \langle u_n^i|\psi\rangle$.

6. Az állapot időfejlődését a Schrödinger egyenlet adja meg.

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = H |\Psi\rangle \quad (9.11)$$

ahol a H a rendszer energiájának megfelelő operátor, a Hamilton operátor. Ennek és általában egyéb operátorok konkrét alakjának a megadásához elmélet bizonyos iránymutatásokat ad, lásd alább a kvantálási szabályok c. pontot. De csakúgy mint a klasszikus mechanikában a Hamilton függvényt, vagy az erőtvények alakját Newton törvényei nem rögzítik, az operátorok konkrét alakjának megadása nem része a kvantummechanika posztulátumainak.

7. Sokrészesekrendszerekre vonatkozó posztulátum, amelyből speciálisan következik a Pauli elv.

Ezt a posztulátumot később fogjuk kimondani.

A posztulátumokat kiegészítjük még az úgynevezett kvantálási szabályokkal. Legyen \mathcal{A} klasszikus fizikai mennyiség, a koordináta és impulzus valamilyen függvénye $\mathcal{A}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. A megfelelő kvantummechanikai operátort úgy kapjuk, hogy az $A_s(\mathbf{R}, \mathbf{P})$ operátort tekintjük, ahol, A_s az \mathbf{R} és \mathbf{P} szimmetrizált függvénye. Bizonyos esetekben azonban az operátort más megfontolások alapján keressük meg. Azt, hogy az így vagy úgy felírt operátor alakja helyes-e, az eredményekből levont fizikai következtetések helyessége, azaz a modell konzisztenciája dönti el. Csakúgy mint a klasszikus fizikában az erőtvények helyes alakját az dönti el, hogy a megfelelő mozgásegyenletből következő megoldás megegyezik-e a tapasztalattal.

10. Mérések, középérték, szórás

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

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

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

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

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

A fenti 10.1 összegből így kapott határértéket az \mathcal{A} fizikai mennyiség, illetve a kvantummechanikában inkább az A operátor várható értékének nevezzük, és $\langle A \rangle$

-val jelöljük:

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

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

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_\psi &= \sum_k \sum_i |\langle u_k^i | \psi \rangle|^2 \alpha_k = \sum_k \sum_i \langle \psi | u_k^i \rangle \langle u_k^i | \psi \rangle \alpha_k = \\ &= \sum_k \sum_i \langle \psi | \alpha_k u_k^i \rangle \langle u_k^i | \psi \rangle = \sum_k \sum_i \langle \psi | A u_k^i \rangle \langle u_k^i | \psi \rangle = \langle \psi | A \psi \rangle \end{aligned} \quad (10.4)$$

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

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_k \tilde{\alpha}_k \mathcal{P}(\tilde{\alpha}_k) \Delta\alpha_k \rightarrow \int \alpha \mathcal{P}(\alpha) d\alpha = \int \alpha |\langle w_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha = \langle \psi | A \psi \rangle \quad (10.5)$$

A várható érték lineáris:

$$\langle A + B \rangle_\psi = \langle A \rangle_\psi + \langle B \rangle_\psi, \quad \langle cA \rangle_\psi = c \langle A \rangle_\psi \quad (10.6)$$

Egy másik mennyiség, amelyet szintén használnak a valószínűségi számításban is, a szórás, amely az átkagtól való közepes négyzetes eltérés négyzetgyöke. A fizikai mennyiség szórásnégyzetét a

$$(\Delta A)_\psi^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle_\psi - \langle A \rangle_\psi^2 \quad (10.7)$$

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

van. Legyen

$$\langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 \psi \rangle = \langle A - \langle A \rangle \psi | (A - \langle A \rangle) \psi \rangle = 0. \quad (10.8)$$

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

$$A |\psi\rangle = \langle A \rangle |\psi\rangle \quad (10.9)$$

s ez éppen azt jelenti, hogy $|\psi\rangle$ egy sajátállapot. Valóban, a sajátállapotokon végrehajtott mérés mindig ugyanazt a neki megfelelő sajátértéket adja eredményül, ezek várható értéke ugyancsak ez a sajátérték, és a szórás nyilvánvalóan 0.

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

11. Heisenberg egyenlőtlenség

Ha két fizikai mennyiség operátora fölcserélhető, akkor mint láttuk, létezik olyan bázis, amely mindkét operátornak egyszerre sajátvektor rendszere. Ezeken az állapotokon hajtva végre a mérést, mindkét mennyiség szórásmentesen mérhető. Ha viszont a két operátor nem fölcserélhető, akkor általában nincs ilyen bázisvektorrendszer és ekkor azt szokás mondani, hogy a két mennyiség nem mérhető “egyidejűleg”, noha itt időről valójában nincsen szó. Szimbolikusan mutatja ezt az eredményt a 4 ábra. Ha a két mennyiség operátora nem fölcserélhető, akkor tetszőleges állapotban fennáll egy, a mért mennyiségek, azaz a megfelelő operátorok, szórására vonatkozó egyenlőtlenség. Ha A és B önadjungált operátorok, és ezek nem fölcserélhetőek, akkor kommutátoruk

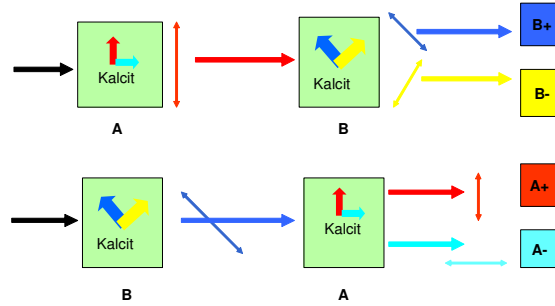
$$[A, B] = iC, \quad (11.1)$$

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

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq |\langle C \rangle|/2 \quad (11.2)$$

Heisenberg vagy Heisenberg-Robertson egyenlőtlenségnek nevezett összefüggés.

A bizonyításhoz tekintsük először a lineáris vektorterekben értelmezett belső szorzat egy fontos tulajdonságát az ún. Cauchy-Bunyakovszkij-Schwarz-(Weyl)



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

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

egyenlőtlenséget, amely szerint két tetszőleges vektor φ és χ esetén

$$\langle \varphi | \varphi \rangle \langle \chi | \chi \rangle \geq |\langle \varphi | \chi \rangle|^2, \quad (11.3)$$

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

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

Most áttérünk a 11.2 egyenlőtlenség bizonyítására. Legyen $|\psi\rangle$ tetszőleges nem zéró vektor, és jelöljük A várható értékét a $|\psi\rangle$ állapotban $\langle A \rangle$ -val $\langle A \rangle =$

$\langle \psi | A \psi \rangle$, és hasonlóan legyen $\langle B \rangle = \langle \psi | B \psi \rangle$. Legyen most

$$|\varphi\rangle = (A - \langle A \rangle) |\psi\rangle \quad (11.4)$$

illetve

$$|\chi\rangle = (B - \langle B \rangle) |\psi\rangle. \quad (11.5)$$

Ekkor a ψ állapotban vett szórás definíciója szerint:

$$\langle \varphi | \varphi \rangle = (\Delta A)^2, \quad \text{illetve} \quad \langle \chi | \chi \rangle = (\Delta B)^2 \quad (11.6)$$

továbbá

$$\begin{aligned} |\langle \varphi | \chi \rangle|^2 &= |\langle (A - \langle A \rangle) \psi | (B - \langle B \rangle) \psi \rangle|^2 = \\ &= |\langle \psi | (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) \psi \rangle|^2 = |\langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle|^2. \end{aligned} \quad (11.7)$$

Beírva ezeket a CBS egyenlőtlenségbe kapjuk, hogy

$$|\langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle|^2 \leq (\Delta A)^2 (\Delta B)^2. \quad (11.8)$$

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

$$\langle AB \rangle \equiv \left\langle \frac{1}{2}(AB + BA) + \frac{1}{2}(AB - BA) \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2}(AB + BA) + i\frac{1}{2}C \right\rangle, \quad (11.9)$$

ahol kihasználtuk, hogy az antiszimmetrikus tag éppen A és B kommutátorának a fele azaz $iC/2$. Az első tag, a szimmetrikus rész egyszerűen láthatóan önadjungált, tehát várható értéke valós, míg $iC/2$ várható értéke tiszta képzetes $i\langle C \rangle/2$. A 11.8 bal oldalán álló abszolút érték négyzetéhez $\langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$ valós része

$$\left\langle \frac{1}{2}(AB + BA) \right\rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle =: \sigma_{AB} \quad (11.10)$$

amelyet az A és B operátorok korrelációjának nevezünk a ψ állapotban. $\langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$ képzetes része viszont éppen $\langle C \rangle/2$. Így a 11.8 bal oldalán szereplő

abszolút érték négyzet vagyis a valós és képzetes rész abszolút értékének négyzetösszege $\sigma_{AB}^2 + \frac{1}{4} |\langle C \rangle|^2$, azaz 11.8 a következőképpen írható

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \sigma_{AB}^2 + |\langle C \rangle|^2 / 4 \quad (11.11)$$

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

$$\sigma_{AA} \sigma_{BB} - \sigma_{AB}^2 \geq |\langle C \rangle|^2 / 4 \quad (11.12)$$

formába is írható. Ennek az egyenlőtlenségnek azonban gyakran egy gyöngébb alakját használjuk. Mivel σ_{AB}^2 nemnegatív, a 11.11 összefüggés jobb oldalát ezzel csökkentve az egyenlőtlenség még inkább érvényes lesz, tehát

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq |\langle C \rangle|^2 / 4, \quad (11.13)$$

vagyis

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq |\langle C \rangle| / 2, \quad (11.14)$$

amely az egyenlőtlenség általában használt alakja. Lényeges, hogy az itt szereplő mennyiségek, tehát a szórás, illetve a várható értékek függenek attól az állapottól, amelyre vonatkozóan kiszámítjuk ezeket, de az egyenlőtlenség tetszőleges olyan állapotban érvényes, amelyekre az A , B és C értelmezve vannak. Az egyenlőtlenség 11.14 alakját tetszőleges operátorokra először Robertson írta föl.

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

$$(\Delta X)(\Delta P) \geq \hbar / 2, \quad (11.15)$$

amelyet, Heisenberg egyenlőtlenségnek, illetve néha bizonytalansági relációnak szokás nevezni.

Az egyenlőtlenségek ezen alakjai statisztikus jelentésűek, a szórásokat illetve a várható értékeket egy adott állapoton elvégzett sok mérésből lehet kiszámítani, és az egyenlőtlenség ezekre vonatkozik. Ebben az értelemben a 11.15 egyenlőtlenséget először Schrödinger írta föl. Heisenbergtől egy más fizikai jelentésű egyenlőtlenség származik, amelyet ő az ún. gamma mikroszkópja kapcsán mutatott be. Eszerint egyetlen helymérés során az impulzus megváltozik és fordítva, úgy, hogy egyetlen mérésben az elvi bizonytalanságok szorzata kisebb mint \hbar . Ennek ellenére hagyományosan az 11.15 egyenlőtlenséget szokták Heisenberg egyenlőtlenségnek.

nevezni.

Vizsgáljuk meg, hogy melyek azok a speciális ψ_0 állapotok amelyekre

$$(\Delta A)_{\psi_0}(\Delta B)_{\psi_0} = |\langle C \rangle_{\psi_0}|/2, \quad (11.16)$$

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

$$(A - \langle A \rangle)|\psi_0\rangle = \lambda(B - \langle B \rangle)|\psi_0\rangle \quad (11.17)$$

egyenletnek kell teljesülnie. Más szóval a két operátor a *kérdéses állapot*on csak egy konstansszorosban különbözhet egymástól. Az egyenlőséghez emellett még az is szükséges, hogy σ_{AB} eltűnjék a 11.11 szerint.

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

$$\langle \psi_0|(A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle)\psi_0\rangle = (\Delta A)^2/\lambda, \quad (11.18)$$

$$\langle \psi_0|(B - \langle B \rangle)(A - \langle A \rangle)\psi_0\rangle = \lambda(\Delta B)^2. \quad (11.19)$$

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

$$(\Delta A)^2/\lambda + \lambda(\Delta B)^2 = 0 \quad (11.20)$$

$$(\Delta A)^2/\lambda - \lambda(\Delta B)^2 = i\langle C \rangle \quad (11.21)$$

amiből $\lambda = \frac{2(\Delta A)^2}{i\langle C \rangle} = \frac{-i\langle C \rangle}{2(\Delta B)^2}$. Tehát a keresett állapotokon, azokon amelyeken 11.14 egyenlőségbe megy át érvényes, hogy $(A - \langle A \rangle)\psi_0 = \lambda(B - \langle B \rangle)\psi_0$, a fenti λ -val. Ezeket *intelligens állapotoknak* szokás nevezni.

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

$$(x - \langle X \rangle)\psi_0(x) = \frac{2(\Delta X)^2}{i\hbar}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - \langle P_x \rangle)\psi_0(x) \quad (11.22)$$

Ennek a differenciálegyenletnek a normált megoldása:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi(\Delta X)^2}} \exp\left\{-\frac{(x - \langle X \rangle)^2}{4(\Delta X)^2} + i\langle P_x \rangle x/\hbar\right\} \quad (11.23)$$

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

Feladatok:

1. Oldjuk meg a 11.22 egyenletet.
2. Keresük meg ψ_0 -t impulzusreprezentációban. a) úgy, hogy a megfelelő egyenletet impulzusreprezentációban oldjuk meg, b) keressük meg $\psi_0(x)$ Fourier transzformáltját.

12. Időfejlődés, Schrödinger egyenlet, kontinuitási egyenlet

12.1. A Schrödinger egyenlet általános tulajdonságai:

A Schrödinger egyenlet alakja:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = H |\Psi(t)\rangle \quad (12.1)$$

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

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

használjuk a Schrödinger egyenletet, továbbá azt, hogy a H önadjungált:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \frac{\partial \Psi}{\partial t} \rangle = \quad (12.2)$$

$$= \langle \frac{1}{i\hbar} H \Psi | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \frac{1}{i\hbar} H \Psi \rangle = \quad (12.3)$$

$$= -\frac{1}{i\hbar} \langle H \Psi | \Psi(t) \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi(t) | H \Psi \rangle = 0 \quad (12.4)$$

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

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1 \quad (12.5)$$

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

$$U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle = |\Psi(t)\rangle, \quad (12.6)$$

amely eszerint azzal a tulajdonsággal is bír, hogy

$$\langle U(t, t_0) \Psi(t_0) | U(t, t_0) \Psi(t_0) \rangle = \langle \Psi(t_0) | \Psi(t_0) \rangle = 1 \quad (12.7)$$

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

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

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (12.8)$$

A Schrödinger egyenlet alakja így:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \left(\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) |\Psi(t)\rangle \quad (12.9)$$

Írjuk ezt most koordinátareprezentációba:

$$i\hbar \langle \mathbf{r} | \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \langle \mathbf{r} | \left(\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) |\Psi(t)\rangle \quad (12.10)$$

azaz

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (12.11)$$

Ez utóbbi egyenletet írta föl lényegében Schrödinger és ennek speciális stacionárius

megoldásait használta sajátértékegyenletként, amiről később esik majd szó.

12.2. Kontinuitási egyenlet

Most a koordinátareprezentációba írt 12.11 Schrödinger egyenlet egy következményét fogjuk levezetni, amelyet kontinuitási egyenletnek nevezünk. Szorozzuk a 12.11 egyenletet $\Psi^*(\mathbf{r},t)$ -vel, a komplex konjugált egyenletet pedig $\Psi(\mathbf{r},t)$ -vel és vonjuk ki az előbbiből az utóbbit:

$$i\hbar \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*) \quad (12.12)$$

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi + \Psi \Psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \quad (12.13)$$

alakba is írhatjuk, azaz

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\mathbf{r},t)|^2 + \frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = 0. \quad (12.14)$$

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

$$\frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) := \mathbf{j} \quad (12.15)$$

vektort pedig valószínűségi áramsűrűség vektornak nevezzük. Ennek alapján fennáll a

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r},t) + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (12.16)$$

kontinuitási egyenletnek nevezett összefüggés, amely formailag teljesen analóg a mechanika illetve az elektrodinamika kontinuitási egyenletével, melyek a tömeg illetve a töltés megmaradását fejezik ki. A 12.16 kvantummechanikai változat a ρ és \mathbf{j} értelmezés szerint a részecske megtalálási valószínűségének lokális megmaradását fejezi ki. Ezt a szokásos módon integrális alakban is megfogalmazhatjuk egy rögzített térfogatra integrálva, a Gauss tétel alkalmazásával kapjuk, hogy

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}} \rho(\mathbf{r},t) = - \oint_{\mathcal{F}} \mathbf{j} \cdot d\mathbf{f}. \quad (12.17)$$

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

13. A várható értékek időfejlődése, Ehrenfest tétele

Vizsgáljuk az A önadjungált operátor által reprezentált fizikai mennyiség

$$\langle \Psi(t) | A \Psi(t) \rangle \equiv \langle A \rangle \quad (13.1)$$

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

$$\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle. \quad (13.2)$$

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

$$\frac{\partial \langle \mathbf{R} \rangle}{\partial t} = \frac{\langle \mathbf{P} \rangle}{m} \quad (13.3)$$

$$\frac{\partial \langle \mathbf{P} \rangle}{\partial t} = -\langle \nabla V(\mathbf{R}) \rangle \quad (13.4)$$

Ez utóbbiakat, melyek a klasszikus mozgásegyenlet kvantumos analogonjai, nevezük Ehrenfest tételeinek.

Hasonlóságok és különbségek a klasszikus mozgásegyenlettel. Vizsgáljuk meg most, hogy milyen értelemben felelnek ezek meg a klasszikus mozgásegyenletnek egy $\Psi(\mathbf{r}, t)$ hullámfüggvénnyel jellemzett részecske esetén. Az $\langle \mathbf{R} \rangle$ várható érték, három időtől függő számot jelent, ez egy durva jellemzője a mozgásának, mert ez csupán a $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ valószínűségi sűrűség "súlypontja". Fölvetődik a kérdés, hogy ez a súlypont úgy mozog-e mint a megfelelő klasszikus mechanikai probléma esetén maga a részecske. Ez akkor lenne így, ha 13.4 jobb oldalán az \mathbf{F}_{cl} klasszikus erő értéke állana a súlypont helyén, azaz, ha érvényes lenne, hogy

$\mathbf{F}_{cl}(r = \langle \mathbf{R} \rangle) = -\nabla V(r = \langle \mathbf{R} \rangle)$. Azonban a jobboldalon

$$-\langle \nabla V(\mathbf{R}) \rangle \neq -\nabla V(r = \langle \mathbf{R} \rangle) \quad (13.5)$$

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

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

$$\begin{aligned} \langle \nabla V(\mathbf{R}) \rangle &= \int d^3r \Psi^*(\mathbf{r}, t) [\nabla V(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 [\nabla V(\mathbf{r})] \approx \\ &\approx \nabla V(\mathbf{r} = \langle \mathbf{R} \rangle) \int d^3r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \nabla V(\mathbf{r} = \langle \mathbf{R} \rangle) \end{aligned} \quad (13.6)$$

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

14. Az időfüggő Schrödinger egyenlet megoldása konzervatív rendszerekere.

Tegyük föl, hogy a

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = H |\Psi\rangle. \quad (14.1)$$

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

$$H |u_{n,j}\rangle = \varepsilon_n |u_{n,i}\rangle \quad (14.2)$$

szerinti sorfejtés alakjában:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum c_n^j(t) |u_{n,j}\rangle, \quad (14.3)$$

ahol föltételeztük azt, hogy H spektruma diszkrét. Itt a $c_n^j(t)$ együtthatók az idő függvényei, és az $|u_{n,j}\rangle$ rendszer az időtől független ortonormált bázis a térben. Az utóbbi tulajdonságot a H önadjungált volta biztosítja. Írjuk be ezt a sorfejtést 14.1-ba, kapjuk, hogy

$$i\hbar \sum \frac{\partial}{\partial t} c_n^j(t) |u_{n,j}\rangle = H \sum c_n^j(t) |u_{n,j}\rangle = \sum c_n^j(t) \varepsilon_n |u_{n,j}\rangle \quad (14.4)$$

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_n^j(t) = c_n^j(t) \varepsilon_n \quad (14.5)$$

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

$$\Psi(t) = \sum c_n^j(t_0) e^{-i\varepsilon_n(t-t_0)/\hbar} |u_{n,j}\rangle \quad (14.6)$$

Ezek szerint a Schrödinger egyenlet megoldásának egyik lehetséges módja, ha megkeressük H sajátértékeit és sajátvektorait, mert ezek segítségével a megoldás a fenti sor segítségével előállítható. A $c_n^j(t_0)$ kezdeti kifejtési együtthatókat a keresett megoldás kezdeti értéke szabja meg, amelyet egy konkrét megoldás fölírásához meg kell adnunk. Legyen ez $|\Psi(t_0)\rangle$, akkor

$$|\Psi(t_0)\rangle = \sum c_n^j(t_0) |u_{n,j}\rangle, \quad (14.7)$$

amiből

$$c_n^j(t_0) = \langle u_{n,j} | \Psi(t_0) \rangle. \quad (14.8)$$

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

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

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

Ha a H spektruma folytonos, akkor hasonló megfontolással a

$$\Psi(t) = \int \sum_{j=1}^{g_\varepsilon} e^{-i\varepsilon(t-t_0)/\hbar} |u_{\varepsilon,j}\rangle \langle u_{\varepsilon,j} | \Psi(t_0)\rangle d\varepsilon \quad (14.9)$$

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

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

$$|u_{n,j}\rangle e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}, \quad (14.10)$$

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

$$\left(\sum_j c_j |u_{n,j}\rangle \right) e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} \quad (14.11)$$

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

15. Mozgásállandók, Bohr frekvenciák

15.1. Mozgásállandók

Mozgásállandónak nevezünk egy fizikai mennyiséget, amely nem függ explicit az időtől, és amely fölcserezhető a H Hamiltonival:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = 0, \quad (15.1)$$

$$[A, H] = 0. \quad (15.2)$$

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

(i) Mozgásállandó várható értéke tetszőleges állapotban állandó

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi | A \Psi \rangle = 0, \quad (15.3)$$

ez következik a mozgásállandó fönti definíciójából és a (13.2) összefüggésből.

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

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

$$H |u_{n,i,l}\rangle = \varepsilon_n |u_{n,i,l}\rangle \quad (15.4)$$

$$A |u_{n,i,l}\rangle = \alpha_i |u_{n,i,l}\rangle. \quad (15.5)$$

Itt l egy olyan index, amely egy lehetséges további degenerációt jelez, amennyiben A és H nem CSCO. Mivel az $|u_{n,i,l}\rangle$ -k időfejlődése $|u_{n,i,l}\rangle e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}$, ezek minden későbbi időpillanatban is sajátvektorai A -nak ugyanazzal az α_i sajátértékkel, hiszen $A |u_{n,i,l}\rangle e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} = \alpha_i e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} |u_{n,i,l}\rangle$. Ezért nevezzük az α_i sajátértékeket jó kvantumszámmak.

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

15.2. Bohr frekvenciák és a kiválasztási szabályok eredete

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

$$\begin{aligned} \langle \Psi(t) | D | \Psi(t) \rangle &= \sum \sum c_{n'}^{i'*}(0) e^{+i\varepsilon_{n'} t/\hbar} c_n^i(0) e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} \langle u_{n',i'} | D | u_{n,i} \rangle = \\ &= \sum \sum c_{n'}^{i'*}(0) c_n^i(0) e^{+i(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n) t/\hbar} \langle u_{n',i'} | D | u_{n,i} \rangle \end{aligned} \quad (15.6)$$

Tegyük föl most, hogy D nem függ explicite az időtől, a $\langle u_{n',i'} | D | u_{n,i} \rangle$ mátrixelemek tehát állandók. A 15.6 formula mutatja, hogy a $\langle D \rangle$ időfüggését $(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n)/\hbar =$

$\omega_{n'n}$ körfrekvenciával oszcilláló tagok összege adja, ezek éppen a Bohr frekvenciák.

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

16. A szabad részecske kvantummechanikai tárgyalása

A szabad részecske Schrödinger egyenlete egydimenzióban:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{P^2}{2m} \Psi \quad (16.1)$$

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

$$|\Psi(t)\rangle = \int |p\rangle \langle p| \Psi(0) e^{-ip^2 t/2m\hbar} dp, \quad (16.2)$$

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

$$\langle p' | \Psi(t) \rangle = \tilde{\Psi}(p', t) = \int \langle p' | p \rangle \langle p | \Psi(0) e^{-ip^2 t/2m\hbar} dp = \quad (16.3)$$

$$= \int \delta(p' - p) \tilde{\psi}_0(p) e^{-ip^2 t/2m\hbar} dp = \tilde{\psi}_0(p') e^{-ip'^2 t/2m\hbar} \quad (16.4)$$

azaz a megoldás impulzusreprezentációjában:

$$\tilde{\Psi}(p, t) = \tilde{\psi}_0(p) e^{-ip^2 t/2m\hbar} \quad (16.5)$$

Koordinátareprezentációban az eredmény ennek a Fourier transzformáltja p' helyett p -vel:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\psi}_0(p) e^{-ip^2 t/2m\hbar} e^{ipx/\hbar} dp \quad (16.6)$$

Ha a kezdeti állapotban a $\psi_0(x)$ koordináta hullámfüggvény adott, akkor ebből

$$\tilde{\psi}_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi_0(x) e^{-ipx/\hbar} dx \quad (16.7)$$

majd ennek ismeretében a 16.6 alapján lehet meghatározni $\Psi(x, t)$ -t, mindkét lépés egy Fourier transzformáció.

Közvetlenül koordinátareprezentációban is megoldhatjuk a problémát. Az energiasajátértékegyenlet ebben az esetben:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} = \varepsilon u \quad (16.8)$$

Ennek normálható függvényt komponensenként előállító megoldásai csak az $\varepsilon \geq 0$ esetben vannak. A 16.8 másodrendű egyenlet két lineárisan független megoldása közül a következő párokat szokás választani:

$$e^{ikx}, \quad e^{-ikx} \quad (16.9)$$

$$\cos kx, \quad \sin kx \quad (16.10)$$

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

$$\int_0^\infty (c_+(\varepsilon) e^{ikx} + c_-(\varepsilon) e^{-ikx}) e^{-i\varepsilon t/\hbar} d\varepsilon. \quad (16.11)$$

Ez átírható k szerinti integrálok összegévé

$$\int_0^\infty \tilde{c}_+(k) e^{ikx} e^{-i\frac{\hbar^2 k^2 t}{2m}} \frac{\hbar^2 k}{m} dk - \int_0^\infty \tilde{c}_-(-k) e^{ikx} e^{-i\frac{\hbar^2 k^2 t}{2m}} \frac{\hbar^2 k}{m} dk = \quad (16.12)$$

$$= \int_{-\infty}^\infty f(k) e^{ikx} e^{-i\frac{\hbar^2 k^2 t}{2m}} dk, \quad (16.13)$$

ahol

$$\tilde{c}_{\pm}(k) = c_{\pm}(\hbar^2 k^2 / 2m) \quad \text{és} \quad f(k) = \begin{cases} \tilde{c}_+(k) \frac{\hbar^2 k}{m} & \text{ha } k > 0, \\ \tilde{c}_-(-k) \frac{\hbar^2 k}{m} & \text{ha } k < 0. \end{cases} \quad (16.14)$$

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

Feladat: Milyen operátor sajátértékei tesznek különbséget a $\cos kx$, és $\sin kx$ energiasajátfüggvények között?

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

$$\frac{d\langle X \rangle}{dt} = \langle P \rangle / m, \quad \frac{d\langle P \rangle}{dt} = 0 \quad \langle P \rangle = p_0, \quad (16.15)$$

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

$$\frac{d(\Delta P)^2}{dt} = \frac{d\langle P^2 \rangle}{dt} - \frac{d\langle P \rangle^2}{dt} = 0 \quad (16.16)$$

Most megmutatjuk, hogy a koordináta szórása viszont nő, az állapot szétfolyik. mert a fázissebesség p függő: ez olyan mint egy diszperzív közegben terjedő elektromágneses hullám szétfolyása.

$$\begin{aligned} \frac{d(\Delta X)^2}{dt} &= \frac{d\langle X^2 \rangle}{dt} - \frac{d\langle X \rangle^2}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [H, X^2] \rangle - 2\langle P \rangle / m = \\ &= \langle XP + PX \rangle / m - 2\langle P \rangle \langle X \rangle / m = \frac{2\sigma_{PX}}{m} \end{aligned} \quad (16.17)$$

σ_{PX} a 11 szakaszban bevezetett korrelációs függvény, amely szabad részecske esetén, mint mindjárt látni fogjuk, az időnek lineáris függvénye. Deriváljuk idő szerint még egyszer $(\Delta X)^2$ -et

$$\begin{aligned} \frac{d^2(\Delta X)^2}{dt^2} &= \frac{i}{m\hbar} \langle [H, XP + PX] \rangle - 2\langle P \rangle^2 / m^2 = \frac{i}{2m^2\hbar} \langle [P^2, XP + PX] \rangle = \\ &= \frac{2}{m^2} (\langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2) = \frac{2}{m^2} (\Delta P)^2. \end{aligned} \quad (16.18)$$

mert

$$P^2XP - XPP^2 = P^3X + i\hbar P^2 - XP^3 = -2i\hbar P^2, \quad (16.19)$$

$$P^2PX - PXP^2 = P^3X - XP^3 + i\hbar P^2 = -2i\hbar P^2. \quad (16.20)$$

Mivel $(\Delta P)^2$ 16.16 miatt állandó, 16.18 szerint $\frac{d^2(\Delta X)^2}{dt^2}$ is állandó. Eszerint $\frac{d(\Delta X)^2}{dt}$ s így σ_{PX} is az időnek legfőljebb lineáris függvénye, azaz $(\Delta X)^2$ legfőljebb kvadratikus függvény. Vagyis a 16.18 egyenlet egyszerűen integrálható és

$$(\Delta X)^2 = \frac{2}{m^2}(\Delta P)_0^2 \frac{t^2}{2} + 2\frac{\sigma_{PX}}{m}t + (\Delta X)_0^2. \quad (16.21)$$

A $(\Delta P)_0^2$ a De Broglie hullám kivételével minden állapotban pozitív, ezért elegendő idő múlva a $(\Delta X)^2$ az idő négyzetével arányosan nő, azaz a szabad részecskét jellemző hullámcsomag szétfolyik. Pl. intelligens (Gauss alakú) állapotra amint azt láttuk $\sigma_{PX} = 0$, továbbá ebben az esetben $(\Delta P)_0^2 = \frac{\hbar^2}{4(\Delta X)_0^2}$ így erre az állapotra

$$(\Delta X)^2 = (\Delta X)_0^2 \left(1 + \frac{\hbar^2}{4m^2(\Delta X)_0^4} t^2\right) \quad (16.22)$$

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

17. A harmonikus oszcillátor sajátértékproblémája

A harmonikus oszcillátor Hamilton operátora:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \quad (17.1)$$

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

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X + i \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} P \right) \quad (17.2)$$

és

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X - i \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} P \right) \quad (17.3)$$

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

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (17.4)$$

eredményt kapjuk. Az X és P operátorokat kifejezve a -val és a^\dagger -al, majd ezeket beírva (17.1)-ba a Hamilton operátorra a

$$H = \hbar\omega(a^\dagger a + 1/2) \quad (17.5)$$

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

$$H|\varphi\rangle = \varepsilon|\varphi\rangle \quad (17.6)$$

egyenlet megoldásainak megkeresése az

$$a^\dagger a = N \quad (17.7)$$

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

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

$$aa^\dagger - a^\dagger a = 1 \quad (17.8)$$

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

$$Na = a(N - 1), \quad (17.9)$$

$$Na^\dagger = a^\dagger(N + 1). \quad (17.10)$$

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

$$a^{\dagger k} a^k = N(N - 1)(N - 2) \dots (N - (k - 1)). \quad (17.11)$$

Az összefüggés $k = 1$ esetén nyilván fennáll, hiszen az éppen N (17.7) definíciója. Tegyük föl most, hogy az összefüggés érvényes k -ra és vizsgáljuk azt $k + 1$ -re. Írjuk a vizsgált operátort $a^{\dagger k+1} a^{k+1} = a^{\dagger} a^{\dagger k} a^k a$ alakba, és használjuk a k -ra igaznak föltett 17.11 összefüggésünket:

$$a^{\dagger k+1} a^{k+1} = a^{\dagger} a^{\dagger k} a^k a = a^{\dagger} N(N-1)(N-2) \dots (N-(k-1))a. \quad (17.12)$$

A (17.9) $Na = a(N-1)$ formula felhasználásával az utolsó helyen álló a -t egyenként sorra átvihetjük az előtte álló faktorok elé, miközben minden tényezőt eggyel csökkentünk. Így :

$$\begin{aligned} a^{\dagger k+1} a^{k+1} &= a^{\dagger} N(N-1)(N-2) \dots a(N-1-(k-1)) = \dots \\ &= a^{\dagger} Na(N-2)(N-3) \dots (N-1-(k-1)) \\ &= a^{\dagger} a(N-1)(N-2) \dots (N-1-(k-1)) = \\ &= N(N-1)(N-2) \dots (N-k) \end{aligned} \quad (17.13)$$

Az utolsó sort összehasonlítva 17.11-el látszik, hogy éppen a bizonyítandó összefüggést kaptuk k helyett $k + 1$ -el, azaz az 17.11 minden $k \geq 1$ egészre érvényes.

Az 17.11- képletből következik, hogy N spektrumának nem lehet folytonos része. Ha ugyanis lenne, akkor létezne olyan ν nem egész szám és olyan $|\varphi\rangle$ állapot, amelyre $N|\varphi\rangle = \nu|\varphi\rangle$. Erre a $|\varphi\rangle$ állapotra az előző összefüggés szerint érvényes, hogy:

$$\langle \varphi | a^{\dagger k} a^k | \varphi \rangle = \nu(\nu-1) \dots (\nu-(k-1)) \langle \varphi | \varphi \rangle. \quad (17.14)$$

A bal oldal minden $k \geq 1$ -re nemnegatív, mert bármely $|\varphi\rangle$ állapotra $\langle \varphi | a^{\dagger k} a^k | \varphi \rangle = \langle ||a^k \varphi|| \geq 0$. A jobb oldal viszont $\langle \varphi | \varphi \rangle > 0$ miatt negatív lenne egy olyan (értelemszerűen egész) $k \geq 1$ -re, amelyre $\nu + 1 < k < \nu + 2$ teljesül. Ez az ellentmondás csak akkor nem lép föl, ha N sajátértékeire kikötjük, hogy csak *nemnegatív egész számok* lehetnek. Ekkor ugyanis, ha $\nu = n$ egy egész szám, akkor mind a jobb-, mind a baloldal pozitív, amíg $k \leq n$, és mindkét oldal eltűnik minden $k \geq n + 1$ -re, ami föltételezi azt is, hogy ugyanakkor $a^k |\varphi\rangle = 0$, minden $k \geq n + 1$ -re.

Tegyük föl most, amit alább a koordinátareprezentáció segítségével meg is mutatunk, hogy létezik legalább egy sajátvektor, amelyhez tartozó sajátérték (az előbbiek szerint szükségképpen) valamilyen nemnegatív egész: $\nu = n$. Ezt a

sajátvektort jelöljük $|\varphi_n\rangle$ -el:

$$N|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle \quad (17.15)$$

A 17.14 szerint erre a vektorra az egyenlőség úgy teljesül, hogy minden $k \geq n+1$ -re

$$a^k|\varphi_n\rangle = 0, \quad k = n+1, n+2, \dots \quad (17.16)$$

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

$$a|\varphi_0\rangle = 0. \quad (17.17)$$

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

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

$$Na^\dagger|\varphi_n\rangle = a^\dagger aa^\dagger|\varphi_n\rangle = a^\dagger(a^\dagger a + 1)|\varphi_n\rangle = a^\dagger(n+1)|\varphi_n\rangle = (n+1)a^\dagger|\varphi_n\rangle \quad (17.18)$$

vagyis

$$Na^\dagger|\varphi_n\rangle = (n+1)a^\dagger|\varphi_n\rangle \quad (17.19)$$

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

$$\langle a^\dagger\varphi_n|a^\dagger\varphi_n\rangle = \langle \varphi_n|aa^\dagger\varphi_n\rangle = \langle \varphi_n|(1+a^\dagger a)\varphi_n\rangle = (n+1)\langle \varphi_n|\varphi_n\rangle > 0 \quad (17.20)$$

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

Hasonlóan:

$$Na|\varphi_n\rangle = (n-1)a|\varphi_n\rangle \quad (17.21)$$

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

A $|\varphi_0\rangle$ -t mint legkisebb n -hez – így 17.5 szerint a legkisebb energiasajátértékhez is – tartozó állapotot alapállapotnak szokás nevezni. Az előzőek szerint ezt az ál-

lapot a 17.17 egyértelműen jellemzi, tehát 17.17 -et tekinthetjük az alapállapot definíciójának is, amennyiben megmutatjuk, hogy az $n = 0$ -hoz tartozó sajátvektor, azaz az alapállapot valóban létezik: a hozzá tartozó koordináta hullámfüggvény négyzetesen integrálható. Bizonyításunkból az is következik majd, hogy az alapállapot nem degenerált. Az alapállapotot definiáló (17.17) $a|\varphi_0\rangle = 0$ azaz

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X + i \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} P \right) |\varphi_0\rangle = 0 \quad (17.22)$$

összefüggés koordinátareprezentációban a

$$\left(\frac{m\omega}{\hbar} x + \frac{d}{dx} \right) \varphi_0(x) = 0 \quad (17.23)$$

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

$$\varphi_0(x) = C e^{-\frac{m\omega}{\hbar} \frac{x^2}{2}} \quad (17.24)$$

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

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

$$a|\varphi_{n+1}^i\rangle = c^i|\varphi_n\rangle \quad (17.25)$$

alkalmazzuk erre az a^\dagger -t kapjuk, hogy

$$a^\dagger a|\varphi_{n+1}^i\rangle = c^i a^\dagger|\varphi_n\rangle \quad (17.26)$$

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

$$|\varphi_{n+1}^i\rangle = \frac{c^i}{n+1} a^\dagger |\varphi_n\rangle \quad (17.27)$$

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

$$\varepsilon_n = \hbar\omega(n+1/2) \quad (17.28)$$

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

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

$$|\varphi_n\rangle \equiv |n\rangle \quad (17.29)$$

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

$$a^\dagger |n\rangle = c_+ |n+1\rangle \quad a |n\rangle = c_- |n-1\rangle \quad (17.30)$$

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

$$|c_+|^2 \langle (n+1)|n+1\rangle = \langle n|aa^\dagger|n\rangle = \langle n|a^\dagger a + 1|n\rangle = n+1 \quad (17.31)$$

Így konvenció szerint c_+ -t valósnak és pozitívnak választva

$$a^\dagger |\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle, \quad (17.32)$$

és hasonlóan

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad (17.33)$$

amely $n=0$ esetén éppen az alapállapotot definiáló 17.17 összefüggés.

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

$$|n\rangle = (a^\dagger)^n \frac{1}{\sqrt{n!}} |0\rangle \quad (17.34)$$

alakban. Meg lehet mutatni, hogy ezek a vektorok $n = 1, 2, \dots$ valóban teljes rendszert alkotnak, azaz bármely vektor kifejthető ezek segítségével.

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

$$[N] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \\ 0 & 0 & 2 & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (17.35)$$

$$[a^\dagger] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ \vdots & & \sqrt{3} & \ddots \end{pmatrix} \quad (17.36)$$

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

$$[a] = [a^\dagger]^*{}^T \quad (17.37)$$

A 17.2, 17.3 összefüggések alapján így X és P mátrixa is meghatározható. Ezek voltak azok a mátrixok, amelyeket Heisenberg a harmonikus oszcillátor kvantumos vizsgálata során elsőként megtalált, innen kezdődött a mátrixmechanika.

18. Az impulzusmomentum algebrai elmélete

Egy pontszerű részecske impulzusmomentuma klasszikusan $\vec{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, amelyek összege zárt rendszerben megmarad. De tudjuk, hogy vannak esetek amikor nem zárt rendszerben is megmarad. Pl. centrális erőter. A fönti mennyiségnek megfelelő kvantumos mennyiséget a megfelelő operátorokkal nyerjük a pályaim-

pulzusmomentum operátorát:

$$\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P} \quad (18.1)$$

Az \mathbf{R} és \mathbf{P} komponensei között fönnálló kanonikus fölcserélési relációk alapján.

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \quad (18.2)$$

Összetre ugyanilyen definíció adható.

Kiderült azonban, hogy a kvantummechanikában van a térbeli mozgáshoz nem csatolható belső impulzusmomentum, sajátperdület is. Mint egy a saját tengelye körül forgó labda. Noha ez a hasonlat a kvantummechanika szerint távolról sem tökéletes, mégis valami ilyenre kell gondolni a spin hallatán. Az impulzusmomentum és a spin sem keverendő egy másfajta mennyiséggel a mágneses momentummal. Igaz viszont, hogy töltött részecskék impulzusmomentumához és spinjéhez azzal arányos mágneses momentum csatolódik, és ezért néha a mágneses momentum mérésére vezetnek vissza a spinmérést. Emiatt az impulzusmomentumot általánosabban a következőképpen definiáljuk. Adott egy $\mathbf{J} = \{J_x, J_y, J_z\}$ operátorhármas, amelynek komponensei a

$$[J_i, J_k] = i\hbar\epsilon_{ikl}J_l \quad (18.3)$$

fölcserélési relációknak tesznek eleget. Bizonyítjuk, hogy

$$[J^2, J_k] = 0, \quad k = x, y, z \quad (18.4)$$

Emiatt kereshető közös sajátvektorrendszere J^2 -nek és J_z -nek. J^2 pozitív, ezért sajátértékei is pozitívek. A dimenziókat figyelembe véve a sajátértékegyenlet alakja:

$$J^2 |\varphi_{\lambda, m}\rangle = \hbar^2 \lambda^2 |\varphi_{\lambda, m}\rangle, \quad (18.5)$$

$$J_z |\varphi_{\lambda, m}\rangle = m\hbar |\varphi_{\lambda, m}\rangle, \quad (18.6)$$

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

$$m^2 \leq \lambda^2 \quad (18.7)$$

azaz

$$-\lambda \leq m \leq \lambda \quad (18.8)$$

Vezessük be a

$$J_+ = J_x + iJ_y, \quad J_- = J_x - iJ_y, \quad (18.9)$$

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

$$J^2 J_\pm |\varphi_{\lambda,m}\rangle = J_\pm J^2 |\varphi_{\lambda,m}\rangle = \hbar^2 \lambda^2 J_\pm |\varphi_{\lambda,m}\rangle \quad (18.10)$$

Azaz J_\pm nem vezet ki J^2 -nek egy adott λ^2 -el indexelt sajátalteréből. Nem ez a helyzet viszont J_z esetében mert:

$$[J_z, J_\pm] = \pm \hbar J_\pm \quad (18.11)$$

így

$$J_z J_\pm |\varphi_{\lambda,m}\rangle = (J_\pm J_z \pm J_\pm) |\varphi_{\lambda,m}\rangle = \hbar(m \pm 1) J_\pm |\varphi_{\lambda,m}\rangle. \quad (18.12)$$

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

$$J_z |\varphi_{\lambda,m_\pm}\rangle = m_\pm |\varphi_{\lambda,m_\pm}\rangle, \quad (18.13)$$

azonban

$$J_+ |\varphi_{\lambda,m_+}\rangle = 0, \quad J_- |\varphi_{\lambda,m_-}\rangle = 0. \quad (18.14)$$

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

$$J_+ J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z \quad (18.15)$$

$$J_- J_+ = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z \quad (18.16)$$

összefüggéseket, amelyek kiírással egyszerűen láthatók. Ezekből:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \varphi_{\lambda,m_+} | J_- J_+ | \varphi_{\lambda,m_+} \rangle = \langle \varphi_{\lambda,m_+} | J^2 - J_z^2 - \hbar J_z | \varphi_{\lambda,m_+} \rangle = \\ &= \hbar^2 (\lambda^2 - m_+^2 - m_+) \langle \varphi_{\lambda,m_+} | \varphi_{\lambda,m_+} \rangle \end{aligned} \quad (18.17)$$

$$\begin{aligned}
0 &= \langle \varphi_{\lambda, m_-} | J_+ J_- | \varphi_{\lambda, m_-} \rangle = \langle \varphi_{\lambda, m_-} | J^2 - J_z^2 + \hbar J_z | \varphi_{\lambda, m_-} \rangle = \\
&= \hbar^2 (\lambda^2 - m_-^2 + m_-) \langle \varphi_{\lambda, m_-} | \varphi_{\lambda, m_-} \rangle
\end{aligned} \tag{18.18}$$

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

$$\lambda^2 - m_+^2 - m_+ = 0 \tag{18.19}$$

$$\lambda^2 - m_-^2 + m_- = 0 \tag{18.20}$$

A két egyenlet különbségének bal oldalát szorzattá alakíthatjuk:

$$(m_+ + m_-)(m_+ - m_- + 1) = 0 \tag{18.21}$$

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

$$m_+ = -m_- =: j \tag{18.22}$$

lehetőség, ahol a fönti összefüggéssel definiáltuk a j számot, amely adott λ esetén tehát a legnagyobb sajátértéke J_z -nek. 18.19-ből az is következik, hogy

$$\lambda^2 = m_+(m_+ + 1) = j(j + 1) \tag{18.23}$$

Az előzőek szerint egy m -el jellemzett $|\varphi_{\lambda, m}\rangle$ -ből indulva s J_+ -t alkalmazva léteznek olyan vektorok, amelyek az:

$$m, m + 1, \dots, m + p = m_+ = j \tag{18.24}$$

$$m, m - 1, m - q = m_- = -j \tag{18.25}$$

sajátértékekhez tartoznak, ahol p, q értelemszerűen egész számok. Az $m + p = m_+ = j$, $m - q = m_- = -j$ összefüggések különbségéből:

$$j = \frac{p + q}{2} \tag{18.26}$$

Ebből $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$. Adott j kvantumszámhoz, ha esetén $2j + 1$ db m tartozik $j, j - 1, \dots, -j + 1, -j$

Eredményünk tehát, ha a sajátvektorok indexelését a λ helyett a j -vel csináljuk és $|\varphi_{j,m}\rangle = |j, m\rangle$ jelölést alkalmazzuk a következő:

$$J^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle \quad (18.27)$$

$$J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle \quad (18.28)$$

J^2 és J_z általában nem alkotnak CSCO-t, azaz van vagy vannak további kvantum-számok amelyek egy állapotot egyértelműen jellemeznek, vagy másképpen szólva, adott j és m esetén a $|j, m\rangle$ állapotok között egy vagy több további fizikai mennyiség operátora különbséget tehet, vagyis ebből a szempontból az állapotok degeneráltak. Adott j esetén viszont az m szerinti degeneráció $2j + 1$ -szeres.

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

$$J_+ |j, m\rangle = c_+ |j, m+1\rangle \quad (18.29)$$

$$J_- |j, m\rangle = c_- |j, m-1\rangle \quad (18.30)$$

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

$$\begin{aligned} \langle j, m | J_- J_+ |j, m\rangle &= \langle j, m | J^2 - J_z^2 - \hbar J_z |j, m\rangle = \hbar^2 (j(j+1) - m^2 - m) \langle j, m | j, m\rangle \\ &= |c_+|^2 \langle j, m+1 | j, m+1\rangle \end{aligned} \quad (18.31)$$

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

$$J_+ |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m+1\rangle \quad (18.32)$$

$$J_- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle \quad (18.33)$$

Ezekből J_x illetve J_y mátrixa is meghatározható a 18.9-ből következő $J_x = (J_+ + J_-)/2$ és $J_y = (J_+ - J_-)/2i$ formulákból. A $j = 1/2$ esetben, amelyet feles spinű esetnek nevezünk, ezekből az $m = 1/2, m = -1/2$ sorrendben írva a mátrixele-

meket a

$$J_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_x \quad J_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_y \quad (18.34a)$$

$$J_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z \quad (18.34b)$$

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

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

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

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

$$\mathbf{F} = \nabla(\mathbf{m}\mathbf{B}) = \gamma \nabla(\mathbf{S}\mathbf{B}). \quad (19.35)$$

Itt \mathbf{m} állandó, ha \mathbf{B} is akkor $\mathbf{F} = 0$. Ha viszont a \mathbf{B} inhomogentásának fő iránya az \mathbf{n} irány, akkor $\mathbf{F} = \nabla(\mathbf{m}\mathbf{B}) = \gamma \mathbf{S}\mathbf{n} \frac{\partial}{\partial n} B_n$.

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

$$\mathbf{S}\mathbf{n} |\varphi\rangle = \frac{\hbar}{2} \mu |\varphi\rangle \quad (19.36)$$

egyenlet megoldását, ahol a sajátértékből kiemeltük a $\hbar/2$ -t, így μ dimenziótlan. A $|\varphi\rangle$ -t abban a $|j = 1/2, m = 1/2\rangle =: |z, +\rangle$, $|j = 1/2, m = -1/2\rangle =: |z, -\rangle$ bázis-

ban keressük amelyben S_z diagonális. Tehát a

$$|\varphi\rangle = \alpha |z, +\rangle + \beta |z, -\rangle \quad (19.37)$$

kifejtésben az α és β együtthatókat határozzuk meg. A sajátértékegyenlet.

$$\mathbf{S}\mathbf{n} |n\rangle = S_n(\alpha |z, +\rangle + \beta |z, -\rangle)\psi = \frac{\hbar}{2}\mu(\alpha |z, +\rangle + \beta |z, -\rangle), \quad (19.38)$$

szorozzuk előbb $|z, +\rangle$ -al, majd $|z, -\rangle$ -al és használjuk az ortogonalitást. Ekkor éppen az $\mathbf{S}\mathbf{n}$ operátor $|z, +\rangle, |z, -\rangle$ bázisban vett mátrixának sajátértékegyenletét kapjuk. Ez a mátrix a 18.34-ben megadott mátrixok alapján az $\mathbf{n} = \{n_x, n_y, n_z\}$ komponensekkel, illetve gömbi koordinátákat használva az

$$\mathbf{S}\mathbf{n} = S_x n_x + S_y n_y + S_z n_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} n_z & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & -n_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (19.39)$$

alakú. A sajátértékegyenlet tehát

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \mu \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}. \quad (19.40)$$

A sajátértékekre $\mu = \pm 1$, a megfelelő normált ($|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$) sajátvektorokra

$$\mu = 1 \quad e^{i\psi_+} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad \mu = -1 \quad e^{i\psi_-} \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (19.41)$$

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

$$|n, +\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |z, +\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} |z, -\rangle \quad (19.42)$$

$$|n, -\rangle = -\sin \frac{\theta}{2} |z, +\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi} |z, -\rangle \quad (19.43)$$

Ezekből fordítva

$$|z, +\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |n, +\rangle - \sin \frac{\theta}{2} |n, -\rangle \quad (19.44)$$

$$|z, -\rangle = \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} |n, +\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} |n, -\rangle \quad (19.45)$$

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

Feladat: 1. Határozzuk meg a z irányú berendezés után elhelyezett x illetve y irányú berendezésén való áthaladási amplitúdókat és valószínűségeket.

2. Mik az amplitúdók ha az első berendezés n_1 a második n_2 irányú?

3. Keresük meg az amplitúdókat a $j = 1$ spin esetére.

20. EPR paradoxon, spinkorrelációk, Bell egyenlőtlenség

Teljesnek tekinthető-e a fizikai valóság kvantummechanikai leírása? teszi föl a kérdést A. Einstein, B. Podolsky és N. Rosen 1935-ben. Egzakt definíciót igyekeznek adni a teljes elméletről, s azt mondják, hogy teljes az elmélet, ha a valóság minden elemének megfelel egy fizikai mennyiség az elméletben. Mi a valóság egy eleme? 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.

Legyen pl. $|x_0\rangle$ egy koordináta sajátvektor, a neki megfelelő sajátfüggvény $\langle x | x_0 \rangle = \xi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$ Ha egyetlen részecskét tekintünk, akkor a kvantummechanika nem engedi meg hogy egyszerre beszéljünk a részecske helyéről és impulzusáról, tehát a valóságnak ezek az elemei (amennyiben a koordináta és impulzus ilyenek) hiányoznak az elméletből. Tekintsük azonban azt a korrelált kvantumobjektumot, amelyet a következő hullámfüggvény ír le:

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp' \exp[ip'(x_1 - x_2 + a)/\hbar] = \delta(x_1 - x_2 + a) \quad (20.1)$$

Ez egy olyan részecskepárt ír le, amelyre $x_2 - x_1 = a$ és $p_2 + p_1 = 0$. ebből az következik, hogy ha az egyik részecskén impulzust mérünk akkor abból meg lehet mondani a másik részecske impulzusát is, mert akettő összege nulla, ugyanakkor

a másik részecskén ettől függetlenül mérhetünk helykoordinátát, tehát meg lehet állapítani egyszerre két nemkompatibilis mennyiséget is egy adott részecskére. Azt ugyanis ki kell zárni, hogy a másik részecske impulzusa azért $-p_1$, mert az elsőé p_1 , ugyanis az a nagyon nagy is lehet, tehát akét részecske között nem lehet kauzális kapcsolat.

Bohm féle változat spinekkel: Szingulet spinpár. Két irányban szétrepülő részecskék állapota legyen:

$$|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1 : z+\rangle |2 : z-\rangle - |1z-\rangle |2z+\rangle) \quad (20.2)$$

ψ^- minden irányban így viselkedik, mert akár az 1 akár a 2 részecskére

$$|z+\rangle = \alpha |n+\rangle + \beta |n-\rangle \quad (20.3)$$

$$|z-\rangle = \beta^* |n+\rangle - \alpha^* |n-\rangle \quad (20.4)$$

Ezeket beírva

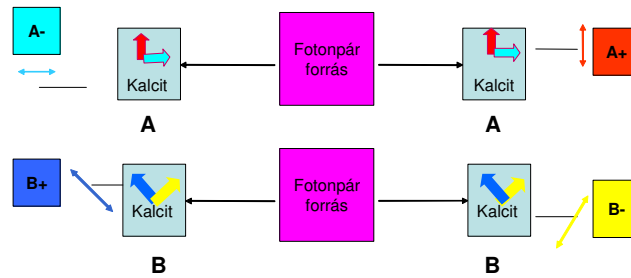
$$\begin{aligned} |\psi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha |1n+\rangle + \beta |1n-\rangle) (\beta^* |2n+\rangle - \alpha^* |2n-\rangle) - \\ &\quad - (\beta^* |n+\rangle - \alpha^* |1n-\rangle) (\alpha |n+\rangle + \beta |n-\rangle) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1 : n+\rangle |2 : n-\rangle - |1n-\rangle |2n+\rangle) \end{aligned}$$

Ugyanez fotonokkal:

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. U.i. nem lehet, hogy a jobb oldalon azért mérünk $+$ -t, mert ezzel egyidőben mérve a baloldali mérés eredménye $-$ volt, mert a hatás hatás terjedéséhez idő kell: ez a „lokális elve”, amit Einstein relativitáselmélete különösen hangsúlyoz. Sőt 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:

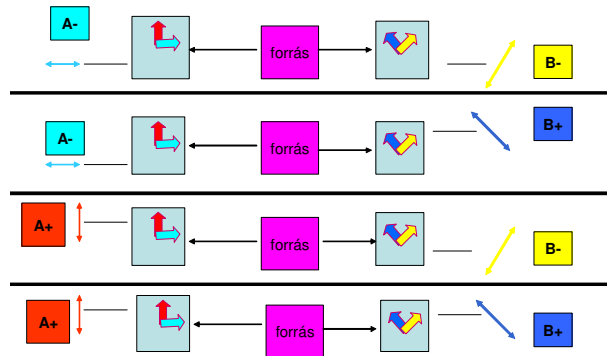
John Bell 1964-ben azt javasolta, hogy mérjünk a baloldalra és a jobboldalra repülő részecskékre háromféle fizikai mennyiséget (spinirányt) A -t B -t és C -t. Kiderül, hogy ezáltal kísérletileg ellenőrizhető, hogy a kvantummechanika vagy a lokális rejtett paraméteres elmélet a helyes. Tegyük föl ugyanis, hogy a részecskepárok tagjainak már a mérés előtt, attól függetlenül mindhárom irányban meghatározott

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



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

Különböző berendezések a két oldalon



irányú + vagy – spinje van, és az ellentétes irányba repülő részecskéknél egy adott irány szempontjából mindig ellentétes a spinje.

A lehetséges párok típusát a táblázat mutatja ezek száma 8, és jelöljük egy konkrét mérésorozatnál a mért részecsepárok típusának számát N_k -val

	bal oldalon			jobb oldalon		
	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>
N_1	+	+	+	-	-	-
N_2	+	+	-	-	-	+
N_3	+	-	+	-	+	-
N_4	+	-	-	-	+	+
N_5	-	+	+	+	-	-
N_6	-	+	-	+	-	+
N_7	-	-	+	+	+	-
N_8	-	-	-	+	+	+

Tekintsük most azokat a párokat amelyekre balra $A+$, jobbra $C+$, az eredmény ezek $N(A+, C+)$ száma a fenti táblázatból $N(A+, C+) = N_2 + N_4$, illetve azokat, amelyekre balra $A+$ jobbra $B+$ ezek száma $N_3 + N_4$, végül azokat, amelyekre balra $B+$ jobbra $C+$ az eredmény, ezek száma $N_2 + N_6$. Kapjuk, hogy

$$N(A+, C+) \leq N(A+, B+) + N(B+, C+) \quad (20.5)$$

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

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

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

és hasonlóan a többi valószínűségekre 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 20.5 egyenlőtlenség a

$$P(A+, C+) \leq P(A+, B+) + P(B+, C+) \quad (20.6)$$

alakba írható, és ez egy Bell egyenlőtlenség, amely nem a kvantummechanikán, hanem azon alapszik, hogy a részecskeparoknak a merés előtt már meghatározott tulajdonságai vannak.

Vizsgáljuk meg mit mond a fenti valószínűségekről a kvantummechanika. tekintsük mondjuk $P(A+, B+)$ -t. Ha a baloldali megfigyelő A -t érve $+$ eredményt kap, akkor a jobboldalon a részecske állapota az A szempontjából $-$, de ott B -t mérünk, és az eredmény $+$. Ennek az előző szakasz eredménye szerint a kvantummechanikai valószínűsége az $A-$ és a $B+$ közötti $\theta_{A-, B+}$ szög felének koszinusz négyzete. Mivel $\theta_{A-, B+} = \pi - \theta_{A+, B+}$

$$P(A+, B+) = \cos^2 \frac{\theta_{A-, B+}}{2} = \sin^2 \frac{\theta_{A+, B+}}{2} \quad (20.7)$$

és hasonlóan a másik két valószínűségekre is. A Bell egyenlőtlenség eszerint

$$\sin^2 \frac{\theta_{A+, C+}}{2} \leq \sin^2 \frac{\theta_{A+, B+}}{2} + \sin^2 \frac{\theta_{B+, C+}}{2} \quad (20.8)$$

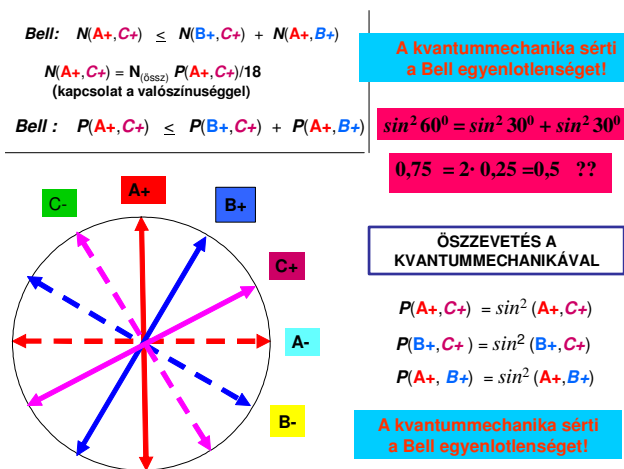
Válasszuk most az $A+$ és $C+$ irányt egymásra merőlegesen, a $B+$ irány pedig legyen a kettő közötti szöget felező 45° -os szögbe mutató irány. Ekkor $\frac{\theta_{A+, C+}}{2} = \pi/4$, míg $\frac{\theta_{A+, B+}}{2} = \frac{\theta_{B+, C+}}{2} = \pi/8$. Kiszámítva a fenti szinuszos négyzetét a

$$0,5 \leq 0,29 \quad ? \quad (20.9)$$

egyenlőtlenséget kapjuk, ami nyilvánvalóan nem érvényes. Ezek szerint a kvantummechanikai valószínűségek sértik a Bell egyenlőtlenséget. Emiatt direkt kísérleti lehetőség nyílik annak megállapítására, hogy a kvantummechanika vagy a Bell egyenlőtlenségek érvényesek. A kísérletek szerint, amelyek közvetlenül a fenti $N(A+, C+)$ mennyiségeket mérik, a Bell egyenlőtlenség alkalmasan választott A B és C irányok esetén nem érvényes, viszont érvényesnek bizonyulnak a kvantummechanika által jósolt eredmények.

Fotonok esetére mutatja a Bell egyenlőtlenség sérülését a 5 ábra

Mindez azt jelenti, hogy vagy a méréstől függetlenül még az előtt egyszerre létező tulajdonságok föltételezése nem igaz, vagy pedig létezik egy nemlokális kommunikáció a pár két tagja között, azaz az egyik részecske állapot azért lesz olyan amilyen, mert a párján, tőle messze, valamilyen adott eredményt mérünk. Meg lehet azonban mutatni, hogy ennek ellenére információt a két mérési hely között ilyen módon nem lehet továbbítani, ebből aszempontból tehát a lokális elv nem sérül.



5. ábra. Kísérleti bizonyítása fotonokkal annak, hogy a kvantummechanika sérti a Bell egyenlőtlenséget

21. Pályaimpulzusnyomaték, gömbi harmonikusok

Az alkalmazások szempontjából nagyon fontosak a pályaimpulzusmomentum koordináta-reprezentációban kiszámított sajátvektorai. Mint azt a 18 szakaszban láttuk az

$$\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P} \quad (21.1)$$

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

Tekintsük most koordinátareprezentációban az

$$L_x = -i\hbar(y\partial_z - z\partial_y) \quad (21.2)$$

stb pályaimpulzusmomentum operátorokat. Ki fog derülni, hogy ezek alakja egyszerűbb a gömbi koordináták használatakor, mert a három derékszögű koordináta x, y és z helyett csak két gömbi koordináta a polár és az azimutszög szerepel a kifejezésekben, a radiális koordináta r nem. Ennek mélyebb oka, hogy az impulzusnyomaték komponensei a forgatásokkal vannak kapcsolatban, ezért a r -et nem változtatják. A transzformációt a gömbi koordinátákba elvégezhetjük a deriváltak transzformációjával, de gyorsabban érünk célunk akövetkező módon. Írjuk

föl egy pont helyvektorát a gömbi koordinátákkal és derékszögű egységvektorokkal.

$$\mathbf{r} = xe_x + ye_y + ze_z = r \sin \theta \cos \phi e_x + r \sin \theta \sin \phi e_y + r \cos \theta e_z \quad (21.3)$$

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

$$e_r = \sin \theta \cos \phi e_x + \sin \theta \sin \phi e_y + \cos \theta e_z = \mathbf{r}/r \quad (21.4)$$

$$e_\theta = \cos \theta \cos \phi e_x + \cos \theta \sin \phi e_y - \sin \theta e_z \quad (21.5)$$

$$e_\phi = -\sin \phi e_x + \cos \phi e_y \quad (21.6)$$

Jól ismert, de közvetlenül is meggyőződhetünk róla, hogy ezek páronként ortogonálisak egymásra, és $e_r \times e_\theta = e_\phi$, $e_r \times e_\phi = -e_\theta$ stb. A pályaimpulzusmomentum alakja koordinátareprezentációban:

$$\mathbf{L} = -i\hbar(\mathbf{r} \times \nabla). \quad (21.7)$$

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

$$\nabla = \sum_i e_i \frac{1}{h_i} \frac{\partial}{\partial q_i} = e_r \partial_r + e_\theta \frac{1}{r} \partial_\theta + e_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi. \quad (21.8)$$

Így az impulzusmomentum alakja a vektori szorzatokal:

$$\mathbf{L} = -i\hbar r (e_\phi \frac{1}{r} \partial_\theta - e_\theta \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi) = \quad (21.9)$$

$$= -i\hbar \{ (-\sin \phi e_x + \cos \phi e_y) \partial_\theta - \quad (21.10)$$

$$- (\cos \theta \cos \phi e_x + \cos \theta \sin \phi e_y - \sin \theta e_z) \frac{1}{\sin \theta} \partial_\phi \} \quad (21.11)$$

Összegyűjtve az e_x, e_y, e_z együtthatóit kapjuk, hogy

$$L_x = i\hbar(\sin \phi \partial_\theta + \cot \theta \cos \phi \partial_\phi) \quad (21.12)$$

$$L_y = i\hbar(-\cos \phi \partial_\theta + \cot \theta \sin \phi \partial_\phi) \quad (21.13)$$

$$L_z = -i\hbar \partial_\phi \quad (21.14)$$

A léptető operátorok koordinátareprezentációs alakja:

$$L_+ = L_x + iL_y = \hbar e^{i\phi} (\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) \quad (21.15)$$

$$L_- = L_x - iL_y = \hbar e^{-i\phi} (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) \quad (21.16)$$

Szükségünk van még az L^2 operátorra is, amelyet legegyszerűbben a 18 szakaszban látott $L^2 = L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z$ alapján számíthatunk ki. Itt $L_z^2 = -\hbar^2 \partial_{\phi\phi}^2$, $-\hbar L_z = i\hbar^2 \partial_\phi$

$$\begin{aligned} L_+L_- &= \hbar^2 e^{i\phi} (\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) [e^{-i\phi} (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi)] = \\ &= \hbar^2 \partial_\theta (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) + \hbar^2 e^{i\phi} i \cot \theta \partial_\phi [e^{-i\phi} (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi)] = \\ &= \hbar^2 (-\partial_{\theta\theta}^2 - i \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi + \underline{i \cot \theta \partial_{\theta\phi}} + \cot \theta (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) - \\ &\quad \underline{-i \cot \theta \partial_{\theta\phi}} - \cot^2 \theta \partial_{\phi\phi}) = \quad (21.17) \\ &= \hbar^2 (-\partial_{\theta\theta}^2 - i \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi + \cot \theta (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) - \cot^2 \theta \partial_{\phi\phi}^2 = \\ &= \hbar^2 (-\partial_{\theta\theta}^2 - i\hbar^2 \partial_\phi - \cot \theta \partial_\theta - \cot^2 \theta \partial_{\phi\phi}^2) \end{aligned}$$

Amiből

$$L^2 = -\hbar^2 (\partial_{\theta\theta}^2 + \cot \theta \partial_\theta + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_{\phi\phi}^2) = -\hbar^2 \Delta_{\theta\phi} \quad (21.18)$$

Az utóbbi egyenlőség arra utal, hogy a $-\hbar^2$ -et szorzó differenciáloperátorról ismert, hogy az a Laplace operátor gömbi koordinátákban fölírt szögektől függő része.

Az általános elméletből (18 szakasz) tudjuk, hogy kereshetjük L^2 és L_z közös sajátfüggvényrendszerét. Az L^2 -nek megfelelő kvantumszámot itt j helyett ℓ -lel szokás jelölni, neve mellékkvantumszám. Így:

$$L^2 \psi(r, \theta, \phi) = \hbar^2 \ell(\ell + 1) \psi(r, \theta, \phi), \quad (21.19)$$

$$L_z \psi(r, \theta, \phi) = m\hbar \psi(r, \theta, \phi). \quad (21.20)$$

Mivel láthatólag sem L^2 sem L_z nem függ r -től, a megoldás

$$\psi(r, \theta, \phi) = \mathcal{R}(r) Y_\ell^m(\theta, \phi) \quad (21.21)$$

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

$$-i\partial_\phi Y_\ell^m(\theta, \phi) = mY_\ell^m(\theta, \phi), \quad (21.22)$$

$$-(\partial_\theta^2 + \cot\theta\partial_\theta + \frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\phi^2)Y_\ell^m(\theta, \phi) = \ell(\ell+1)Y_\ell^m(\theta, \phi) \quad (21.23)$$

egyenletek megoldása. Foglalkozunk az elsővel, amelyben nincs θ szerinti deriválás. Ezért abból láthatólag

$$Y_\ell^m(\theta, \phi) = F_\ell^m(\theta)e^{im\phi}. \quad (21.24)$$

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

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

$$L_+Y_\ell^\ell(\theta, \phi) = 0. \quad (21.25)$$

Ide beírva 21.15-t és 21.24-et $m = \ell$ -l, és leosztva $\hbar e^{i(\ell+1)\phi}$ -vel kapjuk, hogy

$$(\partial_\theta - \ell \cot\theta\partial_\phi)F_\ell^\ell(\theta) = 0. \quad (21.26)$$

Ennek az elsőrendű közönséges differenciálegyenletnek az általános megoldása

$$F_\ell^\ell(\theta) = c_\ell(\sin\theta)^\ell, \quad (21.27)$$

ahol c_ℓ alkalmasan választandó normálási tényező. Ebből a konstans erejéig egyértelmű

$$Y_\ell^\ell(\theta, \phi) = c_\ell(\sin\theta)^\ell e^{i\ell\phi} \quad (21.28)$$

megoldást kapjuk. Innen pedig a további, $m < \ell : Y_\ell^{\ell-1}(\theta, \phi), \dots, Y_\ell^m(\theta, \phi), \dots, Y_\ell^{-\ell}(\theta, \phi)$ megoldások az általános elmélet alapján az L_- operátor ismételt alkalmazásával kaphatók meg. Az $Y_\ell^m(\theta, \phi)$ függvényeket gömbfüggvényeknek, vagy gömbi harmonikusoknak szokás nevezni. Megjegyezzük, hogy ezeket a 21.23 egyenletnek az egységgömb felületén négyzetesen integrálható megoldásaiként is meg lehet kapni. A gömbfüggvények egy konstans erejéig egyértelműen meg vannak határozva, melynek abszolút értékét a normálás határozza meg. (A gömbfüggvények használatakor

figyeljünk arra, hogy a néha komplexnek is választott normálási tényező argumentumára többféle konvenció használatos.) A függvények a normálás után egy ortonormált rendszert alkotnak, azaz az egységgömb felületére integrálva:

$$\int \int (Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \phi))^* Y_{\ell}^m(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}. \quad (21.29)$$

A gömbfüggvények rendszere teljes is, azaz tetszőleges, az egységgömbön értelmezett négyzetesen integrálható $g(\theta, \phi)$ függvény kifejthető ezek általában végtelen összegeként:

$$g(\theta, \phi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} c_{\ell m} Y_{\ell}^m(\theta, \phi) \quad (21.30)$$

Ezek a formulák a Fourier sorok általánosításai az egységkörre az egységgömbre. Egy további tulajdonság: Az $m = 0$ indexű $Y_{\ell}^0(\theta)$ függvények, amelyek nem függenek ϕ -től lényegében a $\cos \theta$ -tól függő Legendre polinomok

$$Y_{\ell}^0(\theta) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_{\ell}(\cos \theta) \quad (21.31)$$

ahol a $P_{\ell}(z)$ a $[-1, 1]$ intervallumon teljes ortogonális polinomrendszer $P_{\ell}(1) = 1$ választással. Az $\ell = 0, 1, 2, 3, 4$ indexű gömbfüggvényeket rendre s, p, d, f, g függvényeknek szokás nevezni a spektroszkópiából kölcsönzött elnevezések miatt.

Az első néhány gömbfüggvény az egyik szokásos fáziskonvenció szerint, ahol a függvények valósak és az előjelük $(-1)^{\ell+m}$ a következő:

$$Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad (21.32)$$

$$Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_1^1(\theta, \phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}, \quad Y_1^{-1}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi}. \quad (21.33)$$

Az $Y_0^0(\theta, \phi)$ a konstans, tehát gömbszimmetrikus s függvény. a következők pedig a p függvények. A gömbfüggvények további tulajdonságai és más általános formulák kvantummechanika illetve matematikai fizika könyvekben található meg.

22. A térbeli paritás

22.1. A paritás definíciója

A paritás vagy párosság operátora olyan \mathcal{H} térben van értelmezve, amelynek egy részecske állapotát adják meg a háromdimenziós koordinátatérben.. Definiáljuk a paritás operátorát az $|\mathbf{r}\rangle$ koordinátabázison:

$$\Pi |\mathbf{r}\rangle = |-\mathbf{r}\rangle \quad (22.1)$$

azaz a Π operátor az \mathbf{r} vektort tükrözi. Figyelem $|-\mathbf{r}\rangle \neq -|\mathbf{r}\rangle$. Ennek megfelelően

$$\Pi |\psi\rangle = \Pi \int \psi(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle d\mathbf{r} = \int \psi(\mathbf{r}) |-\mathbf{r}\rangle d\mathbf{r} = \int \psi(-\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle d\mathbf{r} \quad (22.2)$$

Azaz a koordináta hullámfüggvények terén

$$\Pi \psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}) \quad (22.3)$$

Belátható, hogy Π önadjungált, és unitér is egyben. Sajátértékei ± 1 . Megfelelő sajátfüggvényei a páros illetve a páratlan függvények. Tekintsük a ΠX illetve az $\Pi \mathbf{R}$ operátort a koordinátabázison. Egyrészt $\Pi \mathbf{R} |\mathbf{r}\rangle = r \Pi |\mathbf{r}\rangle = r |-\mathbf{r}\rangle$, másrészt $\mathbf{R} \Pi |\mathbf{r}\rangle = -r |-\mathbf{r}\rangle$. Ebből következik, hogy

$$\mathbf{R} \Pi + \Pi \mathbf{R} = 0 \quad (22.4)$$

azaz $\mathbf{R} \Pi = -\Pi \mathbf{R}$

$$\Pi \mathbf{R} \Pi = -\mathbf{R} \quad (22.5)$$

Az ilyen tulajdonságú operátort páratlannak nevezünk. \mathbf{R} mellett \mathbf{P} is páratlan. Ezen operátorok négyzete viszont páros, azaz fölcserélhető Π -vel. Tehát páros a kinetikus energia operátora, vagy egy centrális erőter esetén a teljes Hamilton operátor mert az $|\mathbf{R}|$ operátor is páros. Ekkor a H -nak és Π nek van közös sajátvektorrendszere, azaz H sajátvektorai között vannak párosak és páratlanok. Figyelem, H -nak ettől függetlenül lehetnek olyan sajátvektorai is, amelyek sem nem párosak sem nem páratlanok!

22.2. Kapcsolat a pályaimpulzusmomentummal

Először is tekintsük a pályaimpulzusmomentum

$$\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P} \quad (22.6)$$

operátorát. Ez a fentiek szerint páros $\Pi\mathbf{L} = \mathbf{L}\Pi$, mert tükrözéskor mind R mind P előjelet vált. Ezért is nevezzük \mathbf{L} -et pszeudovektornak, vagy axiális vektornak, mert a "közönséges" poláris vektorok előjelet váltanak tükrözéskor, \mathbf{L} viszont nem, \mathbf{L} csak a forgatásokkal szemben viselkedik vektorként. \mathbf{L} mindhárom komponense páros

Tekintsük most a pályaimpulzusmomentum sajátfüggvényeit, amelyek alakja

$$f(r)Y_\ell^m(\theta, \phi) \quad (22.7)$$

ahol $f(r)$ tetszőleges, csak $r = |\mathbf{r}|$ -től függő függvény $Y_\ell^m(\theta, \phi)$ pedig egy gömbfüggvény. Világos, hogy $\Pi f(r) = f(r)$, tehát a radiális rész páros. Most megmutatjuk, hogy a szögektől függő rész is határozott paritású, azaz a Π -nek sajátfüggvénye. Tükrözzük ehhez az \mathbf{r} vektort az origóra és nézzük meg mi történik a polár illetve az azimutsszöggel. Belátható geometriai okoskodással, vagy az 21.3 kifejezésében végrehajtott helyettesítéssel algebrai úton, hogy a

$$\theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \phi \rightarrow \phi + \pi \quad (22.8)$$

transzformáció felel meg az $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ transzformációnak. Tekintsük most az $Y_\ell^\ell(\theta, \phi) = \sin^\ell \theta e^{i\ell\phi}$ függvényt és hajtuk végre a fenti helyettesítéseket a szögekben:

$$\Pi \sin^\ell \theta e^{i\ell\phi} = \sin^\ell(\pi - \theta) \theta e^{i\ell(\phi + \pi)} = (-1)^\ell \sin^\ell \theta e^{i\ell\phi} \quad (22.9)$$

Azaz a függvény páros vagy páratlan attól függően, hogy ℓ páros vagy páratlan. Tekintsük most a ΠL_- perátort, ahol L_- a lefelé léptető operátor, mivel ez az \mathbf{L} vektor komponenseinek $L_- = L_x - iL_y$ összege ezért maga is páros:

$$\Pi L_- = L_- \Pi \quad (22.10)$$

amiről közvetlenül is meggyőződhetünk ha az 21.16 -on végrehajtuk a 22.8 transzformációt. Ez igaz L_- minden hatványára is, s így $L_-^k Y_\ell^\ell(\theta, \phi) = Y_\ell^{\ell-k}(\theta, \phi)$ is

$(-1)^\ell$ paritású. Képletben:

$$\begin{aligned}\Pi Y_\ell^m(\theta, \phi) &= \Pi L_-^{\ell-m} Y_\ell^\ell(\theta, \phi) = L_-^{\ell-m} \Pi Y_\ell^\ell(\theta, \phi) = \\ &= (-1)^\ell L_-^{\ell-m} Y_\ell^\ell(\theta, \phi) = (-1)^\ell Y_\ell^m(\theta, \phi)\end{aligned}\quad (22.11)$$

azaz a paritást az ℓ mellékkvantumszám határozza meg.

23. Centrális erőter sajátértékproblémája, a radiális egyenlet

Centrális erőterben a Hamilton operátor:

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(|\mathbf{R}|) \quad (23.1)$$

Az $|\mathbf{R}| = R$ jelöléssel. Megmutatható, hogy L^2 és L_z is fölcserélhető ezzel a H -val, mert H csak skalároktól függ. Ezért kereshetjük majd H , L^2 és L_z közös sajátvektorait. Most kifejezzük L^2 -el \mathbf{P}^2 -et.

$$\mathbf{L}^2 = (\mathbf{R} \times \mathbf{P})^2 \quad (23.2)$$

A klasszikus mechanikában egyszerűen láthatóan $\mathcal{L}^2 = (pr)^2 - r^2 p^2$, amiből

$$p^2 = (pr)^2 / r^2 + \mathcal{L}^2 / r^2 \quad (23.3)$$

a kvantummechanikában viszont, mivel \mathbf{R} és \mathbf{P} komponensei nem cserélhetők föl a következő adódik:

$$\mathbf{L}^2 = (\mathbf{R} \times \mathbf{P})^2 = \mathbf{R}^2 \mathbf{P}^2 - (\mathbf{R} \cdot \mathbf{P})^2 + i\hbar \mathbf{R} \cdot \mathbf{P} \quad (23.4)$$

Ennek belátásához írjuk $\mathbf{L}^2 = L_i L_i = (\epsilon_{ijk} X_j P_k)(\epsilon_{ilm} X_l P_m)$, ahol a kétszer előforduló indexekre összegezni kell. Figyelembe véve az $\epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} = \delta_{jl} \delta_{kn} - \delta_{jn} \delta_{kl}$

összefüggést, kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}
L_i L_i &= X_j P_k X_j P_k - X_j P_k X_k P_j = X_j (X_j P_k - i\hbar \delta_{jk}) P_k - \\
&\quad - X_j (X_k P_k - 3i\hbar) P_j = \\
&= X_j X_j P_k P_k - i\hbar \delta_{jk} X_j P_k - X_j X_k P_j P_k + 3i\hbar X_j P_j = \\
&= X_j X_j P_k P_k + 2i\hbar X_j P_j - X_j (P_j X_k + i\hbar \delta_{jk}) P_k = \\
&= X_j X_j P_k P_k - X_j P_j X_k P_k + i\hbar X_j P_j
\end{aligned}$$

S ez éppen a 23.4 egyenlőség koordinátákkal fölírva. 23.4-ből

$$\mathbf{P}^2 = \left[\frac{1}{\mathbf{R}^2} (\mathbf{R} \cdot \mathbf{P})^2 - i\hbar \mathbf{R} \cdot \mathbf{P} \right] + \frac{1}{\mathbf{R}^2} \mathbf{L}^2 \quad (23.5)$$

Áttérünk koordinátareprezentációba $\mathbf{R} \rightarrow \mathbf{r}$, $\mathbf{P} \rightarrow -i\hbar \nabla$ és gömbi koordinátákra: $\mathbf{r} = \mathbf{e}_r r$, $\mathbf{P} = -i\hbar \nabla = -i\hbar (\mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi})$. Ebből $\mathbf{R} \cdot \mathbf{P} = -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r}$. A \mathbf{P}^2 koordináta reprezentációban gömbi koordinátákban így

$$\begin{aligned}
&\left[\frac{1}{r^2} (-i\hbar r \frac{\partial}{\partial r})^2 + \hbar^2 r \frac{\partial}{\partial r} \right] - \hbar^2 \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\varphi} = \\
&-\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\varphi} = -\hbar^2 \Delta_{r\theta\varphi}
\end{aligned} \quad (23.6)$$

alakú. Meg lehet győződni, hogy $(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}) = (-i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r)^2 = [\frac{1}{2} (\frac{\mathbf{R}}{R} \mathbf{P} + \mathbf{P} \frac{\mathbf{R}}{R})]^2 = P_r^2$. A P_r operátor önadjungált, amit koordinátareprezentációban is bizonyítani lehet.

Szeparáljuk a radiális és a szögektől függő részt a

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \hbar^2 \frac{1}{2m} \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\varphi} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = \varepsilon \psi(r, \theta, \varphi) \quad (23.7)$$

sajátértékegyenletben a $\psi(r, \theta, \varphi) = \mathcal{R}(r) Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \frac{u(r)}{r} Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ föltevással. Az $\mathcal{R}(r)$ függvényre kapható

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \mathcal{R}(r) + \hbar^2 \frac{1}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \mathcal{R}(r) + V(r) \mathcal{R}(r) = \varepsilon \mathcal{R}(r) \right] \quad (23.8)$$

egyenletet radiális egyenletnek nevezzük, ebből nyerjük az $u(r) = r \mathcal{R}(r)$ -re vonatkozó

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u + V(r) u = \varepsilon u \quad (23.9)$$

közönséges differenciálegyenletet, amelyet szintén szokás radiális egyenletnek nevezni. Ennek alakja az u függvényre olyan mint egy egydimenziós problémára vonatkozó energiasajátérték egyenlet, csak a valódi potenciál helyett a $V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$ effektív potenciál szerepel benne. Az $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$ neve centrifugális potenciál, ez analóg a klasszikus mechanikában is megjelenő $\mathcal{L}^2/2mr^2$ potenciállal

24. A radiális egyenlet megoldásainak, aszimptotikus viselkedése

Aszimptotikus viselkedés $r \rightarrow \infty$ esetén. Ha $V(\infty) \rightarrow 0$ akkor esetén a potenciális energia tagot és a centrifugális energiát elhagyva a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} = \varepsilon u \quad (24.1)$$

egyenletet kapjuk, amelyet

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon u = 0 \quad (24.2)$$

alakba írva, fölismerjük, hogy ez egy ismert differenciálegyenlet, amelynek megoldásai $\sin kr$ és $\cos kr$, ha a $\frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon = k^2$ értéke pozitív. Mivel ezek nem négyzetesen integrálhatóak, ezért ezek az $\varepsilon > 0$ energiához tartozó megoldások az úgynevezett szórási állapotok leírására alkalmasak. Ugyanez a helyzet, ha $\varepsilon = 0$, mert a megoldás ekkor lineáris függvény, amely szintén nem négyzetesen integrálható.

Kötött állapotnak nevezett, négyzetesen integrálható megoldásokat csak akkor kapunk, ha $\varepsilon < 0$, ekkor a

$$0 < -\frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon = \kappa^2 \quad (24.3)$$

jelölést szokás alkalmazni. A fenti egyenlet két alkalmas lineárisan független megoldása ekkor $e^{\kappa r}$ és $e^{-\kappa r}$, amelyek közül csak az utóbbi négyzetesen integrálható, ez tehát a hullámfüggvény aszimptotikus viselkedése a ∞ -ben.

Aszimptotikus viselkedés a 0 környezetében. Tegyük föl, hogy a $V(r)$ potenciális energia az $r = 0$ közelében véges marad, vagy ha ∞ -hez is tart, az nem gyorsabb, mint ahogyan $1/r^2$ tart a ∞ -be a 0 körül. Ez utóbbi osztályba tartozik a Coulomb típusú potenciál, amely $1/r$ rendben divergál. Ekkor a 0 körül a potenciális energiát elhagyhatjuk a centrifugális energia tag mellett, és ugyancsak

elhagyhatjuk az εu tagot is. Így a

$$\frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u = 0 \quad (24.4)$$

másodrendű lineáris egyenletet kapjuk, amelynek két megoldása $r^{\ell+1}$ és $1/r^\ell$. Az utóbbi azonban a 0 körüli viselkedése miatt nem lesz négyzetesen integrálható, kivéve az $\ell = 0$ esetet. De ez utóbbi sem engedhető meg, mert ekkor a 0 közelében $\mathcal{R}(r) = \frac{1}{r}$ lenne amelyre alkalmazva a kinetikus energiában szereplő Δ -t az eredmény a $\delta(\mathbf{r})$ Dirac delta, amelyet csak a potenciális energia kompenzálhatna a sajátértékegyenletben, abban az esetben ha az is $\delta(\mathbf{r})$ -el arányos. De kikötöttük, hogy a potenciális energia $1/r^2$ -nél kevésbé szinguláris a 0 körül, tehát ilyen esetben az $\mathcal{R}(r) = 1/r$ sem jöhet szóba, azaz az u függvény a 0 körül a fentebb előírt viselkedésű potenciál esetén $r^{\ell+1}$ -el arányos. Ebből az is látszik, hogy nulla körül a hullámfüggvény radiális része $\mathcal{R}(r) = u(r)/r \sim r^\ell$ azaz nullához tart ha $\ell \neq 0$, és véges ha $\ell = 0$.

Kötött állapotok keresése esetén a fent bevezetett κ - val

$$\frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u - \frac{2m}{\hbar^2} V(r)u = -\frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon u = \kappa^2 u. \quad (24.5)$$

Itt célszerű bevezetni a $\kappa r = \varrho$ dimenziótlan változót, amellyel az u -ra vonatkozó egyenlet azon alakja, amelyet kötött állapotok, tehát $\varepsilon < 0$, esetén használunk:

$$\left(\frac{d^2}{d\varrho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\varrho^2} - \frac{V(\varrho/\kappa)}{|\varepsilon|} - 1 \right) u(\varrho) = 0 \quad (24.6)$$

ahol a fentiek szerint $u(\varrho = 0) \asymp \varrho^{\ell+1}$, $u(\varrho = \infty) \asymp e^{-\varrho}$

25. Vonzó Coulomb potenciál sajátértékproblémája, kötött állapotok

Vonzó Coulomb erő esetén a potenciális energia

$$V(r) = -\frac{\gamma}{r} \quad (25.1)$$

$\gamma > 0$, ahol pl. a nagyon fontos H atom esetén a $\gamma = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} q^2 =: e_0^2$, ahol a q az elemi töltést jelenti. H szerű ionok esetén $\gamma = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} Zq^2$, ahol Z a magtöltés. A

megoldandó sajátértékegyenlet ebben az esetben

$$\left(\frac{P^2}{2m} - \frac{\gamma}{R}\right) |\psi\rangle = \varepsilon |\psi\rangle. \quad (25.2)$$

A kötött állapotokra, tehát az előző szakasz eredménye szerint a negatív ε -okra szorítkozunk. Áttérve koordinátareprezentációra és gömbi koordinátákra, az előző szakasz szerint a ψ energiasajátfüggvényt a

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \mathcal{R}(r) Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \frac{u(r)}{r} Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad (25.3)$$

alakban kereshetjük, ahol a

$$\sqrt{-\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} r = \kappa r = \varrho \quad (25.4)$$

jelöléssel most az $u(\varrho)$ -ra vonatkozó

$$\left(\frac{d^2}{d\varrho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\varrho^2} + \frac{\kappa\gamma}{\varrho|\varepsilon|} - 1\right) u(\varrho) = 0 \quad (25.5)$$

egyenletet kell megoldanunk. Vezessük be a

$$\varrho_0 = \frac{\kappa\gamma}{|\varepsilon|} \quad (25.6)$$

újabb dimenziótlan változót, ekkor az egyenlet

$$\left(\frac{d^2}{d\varrho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\varrho^2} + \frac{\varrho_0}{\varrho} - 1\right) u(\varrho) = 0 \quad (25.7)$$

alakú. A megoldást az előző szakaszban vizsgált aszimptotikus viselkedés alapján az

$$u(\varrho) = \varrho^{\ell+1} w(\varrho) e^{-\varrho} \quad (25.8)$$

alakban keressük, ahol a $\varrho^{\ell+1}$ tényező biztosítja a helyes aszimptotikus alakot a 0 körül, az $e^{-\varrho}$ faktor a ∞ körül, a $w(\varrho)$ keresendő függvény pedig azt, hogy az u főtti alakja az egyenlet pontos megoldása legyen. A $w(\varrho)$ -nak ezen kívül még olyannak is kell lennie, hogy ne rontsa el a ezeket az aszimptotikus alakokat, azaz $w(\varrho)$ -nak a 0 körül hatványsorba fejthetőnek kell lennie (egyébként a 0 körüli viselkedést elrontaná), másrészt a végtelenben lassabban nőhet csak mint e^ϱ . Behelyettesítve u

ezen 25.8 alakját a 25.7 egyenletbe, w -re a következő differenciálegyenletet kapjuk:

$$\varrho \frac{d^2 w}{d\varrho^2} + 2(\ell + 1 - \varrho) \frac{dw}{d\varrho} + (\varrho_0 - 2(\ell + 1))w = 0. \quad (25.9)$$

Keressük most $w(\varrho)$ -t az előzőek szerint a

$$w(\varrho) = \sum_{k=0} a_k \varrho^k \quad (25.10)$$

alakú hatványsor formájában. Beírva ezt a 25.9 egyenletbe, abból a föltételből, hogy w megoldás minden ϱ -ra, a sor együtthatóira egy rekurziós formula adódik:

$$a_{k+1} = \frac{2(k + \ell + 1) - \varrho_0}{(k + 1)(k + 2\ell + 2)} a_k \quad (25.11)$$

Most megmutatjuk, hogy amennyiben a 25.10 összeg, azaz a sor, végtelen lenne, a rekurziós formulából az következne, hogy a w aszimptotikus alakja elromlik, tehát a sor nem lehet végtelen. Valóban, nagy k -ra a fönti sor együtthatói között az $a_{k+1} = \frac{2}{k} a_k$ rekurziós formula áll fönn, s ez ha a sor végtelen, az $e^{2\varrho}$ sorának tulajdonsága, ami elrontaná az előírt $e^{-\varrho}$ jellegű aszimptotikus viselkedést. Emiatt a sornak végesnek kell maradnia, azaz létezik egy olyan n_r amelynél $a_{n_r} \neq 0$, de $a_{n_r+1} = 0$, s ekkor 25.11-ből következően az összes n_r -nél nagyobb indexű a is eltűnik, vagyis a sor egy n_r -ed fokú polinomra redukálódik. Ez úgy és csak úgy lehetséges, ha 25.11 jobb oldalán a tört számlálója eltűnik, azaz

$$\varrho_0 = 2(n_r + \ell + 1) \quad (25.12)$$

A w polinom fokszámát megadó n_r szám neve radiális kvantumszám. Most vezessük be az

$$n := n_r + \ell + 1 \quad (25.13)$$

definícióval a főkvantumszámot, amely szükségképpen pozitív egész szám. Az elnevezés oka, hogy ez a szám határozza meg az energia sajátértékeit. A 25.6 definíció alapján ugyanis

$$\varrho_0 = \frac{\kappa\gamma}{|\varepsilon|} = \frac{\gamma}{|\varepsilon|} \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}} \varepsilon = 2n$$

amiből $\varepsilon = -\frac{\gamma^2 m}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$, s így a $\gamma = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} Zq^2 =: Ze_0^2$ definícióval a Coulomb potenciálnak megfelelő energiasajátértékek a következők

$$\varepsilon_n = -\frac{mZ^2 e_0^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

Ezek a Coulomb potenciál esetén jól ismert stacionárius állapotokhoz tartozó energiasajátértékek, amelyek igen jó közelítéssel visszaadják a H atom spektrumának ($Z = 1$) kísérletileg talált elsődleges szerkezetét, a Lyman, Balmer stb sorozatokat. Az eredmény megegyezik a Bohr modellből kapható formulával, ám a Bohr modell csak erre az esetre, azaz a Coulomb potenciálra jó, a kvantummechanikai eljárás viszont általánosan mindenfajta potenciál esetén helyes eredményt ad.

26. A H atom spektruma

Az előző szakaszban kapott eredmény a $Z = 1$ esetben adja a H atom spektrumának elsődleges szerkezetét. A különféle finimításokról alább esik szó. Az $\frac{me_0^4}{2\hbar^2}$ energiaértéket, amely $2,2 \cdot 10^{-18}$ J, illetve 13,6eV nevezik *1 Rydbergnek*. A H atom stacionárius állapotainak energiái tehát

$$\varepsilon_n = -\frac{1}{n^2} Ry \quad (26.1)$$

ahol az n számot főkvantumszámmak nevezzük. Az előző szakasz eredményéből következően $n = n_r + \ell + 1$, ahol n_r egy polinom fokszáma, tehát egy nemnegatív egész, másrészt tudjuk, hogy, ℓ a mellékvantumszám is nemnegatív egész $\ell = 0, 1, 2, \dots$. Ebből következik, hogy n lehetséges értékei a pozitív egész számok. A legmélyebb energiájú állapot vagy másnéven alapállapot energiája $-1 Ry$, ahhoz az állapothoz képest amikor az elektront a magtól a végtelenbe a 0 potenciálú helyre távolítjuk, úgy hogy ott a kinetikus energiája is még nulla marad. Minimálisan tehát $1 Ry$ energia kell ahhoz, hogy az elektront elszakítsuk a protontól, azaz $1 Ry$ a H atom ionizációs energiája. n növelésével a gerjesztett állapotok energiáit akapjuk, amelyek gyorsan közelednek a 0 energiához, azaz az ionizált állapot felé. Megjegyezzük, hogy a spektrumnak van folytonos része is, ugyanis minden $\varepsilon > 0$ pozitív sajátértékhez tartoznak nem kötött sajátállapotai a probléma 25.2-ban megadott H Hamilton operátorának. ezeket szokás szórásí vagyis nem kötött sajátállapotoknak nevezni. Ezek írják le azt a szituációt, amikor egy részecske, pl elektron, a végtelenből érkeve szóródik egy centrum pl. atommag

által létrehozott potenciálon, majd ismét a végtelenbe távozik valamilyen irányban. A kvantummechanika meg tudja határozni, hogy milyen irányba mekkora valószínűséggel szóródik a részecske. A szórási állapotok meghatározásával azonban itt nem foglalkozunk.

Az előző szakaszban a kötött állapotokhoz tartozó energiasajátértékek mellett valójában a sajátvektorokat, illetve mivel koordinátareprezentációt használtunk, a sajátfüggvényeket is meghatároztuk. A radiális egyenletnek adott n esetén n lineárisan független megoldása van, mivel adott n esetén az $n = n_r + \ell + 1$ egyenlőség miatt az $n_r = 0, \ell = n - 1; n_r = 1, \ell = n - 2; \dots; n_r = n - 1, \ell = 0;$ értékeknek más-más polinom felel meg. Ezeket rendszerint az n és az ℓ értékével indexelik, s így a sajátfüggvények radiális része az előzőek szerint adott n esetén az n számú $\mathcal{R}_{n\ell}(r) = u_{n\ell}(\kappa r)/r$ függvény. Mivel $u_{n\ell}(\kappa r)/r = \frac{(\kappa r)^{\ell+1}}{r} w_{n_r}(\kappa r) e^{-\kappa r}$, ahol $w_{n_r}(\kappa r)$ egy n_r -ed fokú polinom, az $\mathcal{R}_{n\ell}(r)$ függvény egy $n_r + \ell = n - 1$ fokszámú polinom és az $e^{-\kappa r}$ függvény szorzata.

A szögektől függő részt is figyelembe véve, a sajátfüggvények alakja pedig

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = \frac{u_{n\ell}(\kappa r)}{r} Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$$

Adott n esetén így a lineárisan független sőt ortogonális sajátfüggvények száma, az adott ℓ értékhez tartozó $2\ell + 1$ számú lehetséges m értéket, azaz különböző gömbfüggvényt figyelembe véve:

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2 \quad (26.2)$$

Az n főkvantumszámhoz tartozó energiasajátérték ezek szerint n^2 -szeresen elfajult. Valójában azonban, mint tudjuk az elektronnak van még egy belső szabadsági foka, a sajátimpulzusmomentuma másnéven a spinje, amelyre $j = s = 1/2$. A megfelelő m_s két értéket vehet föl $\pm 1/2$, és ez a két állapot is ortogonális. Emiatt az elfajulás valójában $2n^2$ -szeres.

A 25.8 sajátfüggvény radiális részében szereplő $\varrho = \kappa r$ változóban a κ értékét a fentiek figyelembe vételével beírva, a $Z = 1$ esetén $\kappa_n = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} \mathcal{E}} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \frac{me_0^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}} = \frac{me_0^2}{\hbar^2} \frac{1}{n}$ a

$$\varrho = \frac{1}{n} \frac{r}{a_0} \quad (26.3)$$

kifejezést kapjuk, ahol az

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me_0^2} \quad (26.4)$$

hosszúság dimenziójú mennyiség neve a Bohr sugár. Az energiasajátértékeket ezzel kifejezve az

$$\varepsilon_n = -\frac{e_0^2}{2a} \frac{1}{n^2} \quad (26.5)$$

eredmény adódik, melynek egy további fölírási módja:

$$\varepsilon_n = -\frac{mc^2}{2} \alpha^2 \frac{1}{n^2} \quad (26.6)$$

ahol mc^2 az elektron nyugalmi energiája és

$$\alpha = \frac{e_0^2}{\hbar c} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,04} \quad (26.7)$$

(itt q az elektron töltése Coulombban mérve) egy dimenziótlan szám amelyet Sommerfeld vezetett be és finomszerkezetű állandónak nevezzük, mert a H atom finomabb szerkezetét ez az állandó határozza meg.

A sajátfüggvények explicit alakját megtalálhatjuk számos könyvben vagy az interneten pl. a <http://www.phys.unm.edu/~finley/P262/Hydrogen/WaveFns.html> címen. Itt csak az alapállapot normált hullámfüggvényét adjuk meg, melynek alakja

$$\psi_{100}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-r/a_0} \quad (26.8)$$

A különböző n, ℓ számpárokhoz tartozó $\psi_{n\ell m}$ állapotok együttesét héjaknak, a mellékkvantumszám értéke szerint pedig az $\ell = 0, 1, 2, 3$ értékeknek megfelelő hullámfüggvényeket rendre az s, p, d, f pályáknak szokás nevezni. Egy másfajta terminológia szerint az $n = 1$ állapot neve K héj, az $n = 2$ az L héj, $n = 3$ az M héj. Az egyes pályák térbeli szerkezetét, viszonylag jól szemléltetik a <http://www.orbitals.com/orb/orbtable.htm> címen megtekinthető ábrák, ahol a piros szín a függvény pozitív a kék a negatív értékét jelzi.

A fentiekben már utaltunk rá, hogy a Coulomb probléma a H atomnak csak egy közelítése, valójában több olyan effektus van, ami miatt a valódi spektrum különbözik a fönti egyszerű eredménytől. A részletek mellőzésével alább röviden felsoroljuk ezeket.

1. A H atom valójában egy kéttest probléma, a proton tömege szigorúan véve

nem végtelen. Viszonylag egyszerűen megmutatható, hogy a klasszikus mechanikához hasonlóan a tömegközéppont mozgása és a relatív mozgás szétválaszthatók, és a fenti eredmények ebből a szempontból változatlanok, ha az elektron m tömege helyett mindenütt az $m_r = \frac{mm_p}{m+m_p}$ redukált tömeget használjuk, ahol m_p a proton tömege, amely sokkal nagyobb lévén az elektron tömegénél, lényegében alig okoz számszerű változást az eredményekben.

2. Relativisztikus korrekciók. Ezek az elsődleges szerkezetre kapott $1Ry$ nagyságú energiáknál $\alpha^2 \approx 0,53 \cdot 10^{-4}$ -szer kisebbek, de a degenerációt részben föloldják, aminek az az oka, hogy relativisztikus esetben a H Hamilton operátor a spintől is függ és föllép az un. spin-pálya kölcsönhatás.

3. Az úgynevezett Lamb féle eltolódás, amelyet először W. Lambnak sikerült megmérnie 1947-ben. Ez egy kvantumelektrodinamikai effektus, az atomot körülvevő "elektromágneses vákuum" kvantumos tulajdonságainak a következménye. Ennek nagyságrendje az elsődleges szerkezetenél $\alpha^3 |\ln \alpha| \approx 1,9 \cdot 10^{-6}$ szor kisebb.

4. A hiperfinom struktúra, amely a a mag és az elektron spinjének a kölcsönhatásából ered, és amely a finomsztruktúránál kb. 2000-szer kisebb. Ez az alapállapotot is fölhasítja, és az ezen az átmeneten létrejövő 21 cm-es sugárzást lehet megfigyelni a világuírbeli H atomokon.

27. Azonos részecskék

Egy-egy részecske állapotát a korábbiak szerint egy \mathcal{H} THilbert térbeli vektorral írjuk le. Ha több különböző részecskénk van, akkor a leírásra ezen terek úgynevezett tenzori szorzatát használjuk, amely maga is egy Hilbert tér. Ennek definícióját vázoljuk alább. Tekintsük először két vektortér direkt szorzatát, azaz a két tér elemeiből képzett rendezett párokat. Ezután minden rendezett párhoz rendeljünk hozzá egy vektort bilineáris módon. Az így kapott leképezés képtere a tenzori szorzat tér. Részletesebben legyen : $|\varphi(1)\rangle \in \mathcal{H}_1$ és $|\psi(2)\rangle \in \mathcal{H}_2$.

$$\{|\varphi(1)\rangle, |\psi(2)\rangle\} \longrightarrow |\varphi(1)\rangle \otimes |\psi(2)\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \quad (27.1)$$

Összeadás, skalárral való szorzás.

Skaláris szorzat.

Operátorok a tenzori szorzattérben.

Egyszerűsített illetve egyéb jelölések :

$$|\varphi(1)\rangle \otimes |\psi(2)\rangle = |\varphi(1)\rangle |\psi(2)\rangle = |1 : \varphi, 2 : \psi\rangle = |\varphi, \psi\rangle \quad (27.2)$$

Két megkülönböztethető részecske fizikai rendszere esetén az állapotok tere a tenzori szorzat tér.

A kvantummechanikában azonban vannak megkülönböztethetelen részecskék is. Pl. két elektron nem különböztethető meg. Például egy elektron és egy pozitron megkülönböztethető, mert más a töltésük, de két elektron mai ismereteink szerint minden szempontból azonosak. Sokáig úgy gondolták, hogy a több különböző folyamatban is keletkező neutrínók is azonosak. Később kiderült, hogy ez nem így van. Léteznek úgynevezett mű neutrínók és elektron neutrínók. Hasonlóan a kvarkoknak nevezett részecskék között kiderült, hogy un. színtöltésükben különbözhetnek egymástól.

A megkülönböztethetlenség miatt azonban egy érdekes probléma merül föl. Ennek megvilágítására tekintsünk példaként két azonos részecskét és egy olyan kísérletet ahol ezek a laboratóriumban szóródnak egymáson. Legyen a két részecske állapota kezdetben $|1 : p_z; 2 : -p_z\rangle$, ahol $|p_z\rangle$ egy $\hat{\mathbf{z}}$ irányba haladó de Broglie hullám, egy pontosabb leírásnál pedig egy normálható hullámcsomag állapot is, amelyben $\langle P \rangle = p_z$ szórás után $U(t, t_0) |1 : p_z, 2 : -p_z\rangle$. Nézzük annak a valószínűségét, hogy $|1 : p_n, 2 : -p_n\rangle$, de nézhetjük azt is, hogy $|1 : -p_n, 2 : p_n\rangle$, ahol $\hat{\mathbf{n}}$ valamilyen másik irány.

$$|1 : p_z; 2 : -p_z\rangle \longrightarrow |1 : p_n; 2 : -p_n\rangle \quad (27.3)$$

vagy

$$|1 : p_z; 2 : -p_z\rangle \longrightarrow |1 : -p_n; 2 : p_n\rangle \quad (27.4)$$

Ez a két végállapot általános értelemben még "ortogonális" is egymásra, ha. Ha a részecskék megkülönböztethetők, akkor meg lehet mondani, hogy melyik a végállapot. Ha megkülönböztethetetlenek, akkor az eddigiek alapján a kettő közül akármelyik is lehet, sőt az is lehet, hogy az igazi végállapot a kettő lineáris kombinációja:

$$|\Psi_f(1, 2)\rangle = c_1 |1 : p_n; 2 : -p_n\rangle + c_2 |1 : -p_n; 2 : p_n\rangle \quad (27.5)$$

Mivel egy fizikai eredményhez (nevezetesen, hogy egy részecske érkezik az \mathbf{n} irányban elhelyezett detektorba és egy a $-\mathbf{n}$ irányban található) két különböző vektor illetve ezek lineáris kombinációja is rendelhető egyfajta degenerációnak tekinthető.

Ezt nevezzük kicserélődési degenerációnak. Ez azonban fizikai szempontból nem kielégítő. Mi oldja föl a degenerációt és hogyan, azaz mik lesznek a fönt szereplő együtthetők. A természet válasza következő. Az eredmény egyértelmű és bizonyos fajta részecskéknél $|\Psi(1,2)\rangle$ szimmetrikus a részecskék fölcserélésével szemben, másoknál antiszimmetrikus. Szimmetrikusnak nevezünk egy kétrészecske állapotot, ha a részecskék cseréje esetén az állapotvektor önmagába megy át, antiszimmetrikusnak akkor, ha az állapotvektor előjelet vált. Előrebocsátjuk az eredményt amelyet alább részletesen is elemezni fogunk, majd posztulátumként is ki fogunk mondani. Tapasztalati tény a következő. Ha a megkülönböztethetetlen részecskék spinje egész, akkor az állapot szimmetrikus, ha a spin feles akkor antiszimmetrikus.

Általánosabban is meg fogjuk fogalmazni ezt. Tekintsünk egy $\varphi \otimes \psi$ állapotot $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$ -ban, ahol most a két Hilbert tér azonos nmivel a részecskék is azonosak.

Az így definiált P_{21} operátort kétszer alkalmazva nyilván visszakapjuk az eredeti állapotot, ezért $P_{21}^2 = 1$. A P_{21} emellett önadjungált operátor is, mivel az $|u_i u_j\rangle$ bázison a mátrixelemeinek alakja

$$(|u_{i'} u_{j'}\rangle, P_{21} |u_i u_j\rangle) = (|u_{i'} u_{j'}\rangle, |u_j u_i\rangle) = \delta_{i'j} \delta_{j'i} \quad (27.6)$$

a mi megegyezik a P_{21}^+

$$(|u_{i'} u_{j'}\rangle, P_{21}^+ |u_i u_j\rangle) = (P_{21} |u_{i'} u_{j'}\rangle, |u_i u_j\rangle) = (|u_{j'} u_{i'}\rangle, |u_i u_j\rangle) = \delta_{j'i} \delta_{i'j} \quad (27.7)$$

mátrixelemeivel, s így az önadjungáltság föltétele a linearitás miatt ezen báziselemek minden lineáris kombinációjára, azaz tetszőleges vektorra fönnáll. Így

$$P_{21}^+ = P_{21} \quad (27.8)$$

A fönti két tulajdonságból következik, hogy

$$P_{21}^+ P_{21} = P_{21} P_{21}^+ = 1 \quad (27.9)$$

vagyis P_{21} unitér is.

Vizsgáljuk P_{21} sajátvektorait. Ezekre $P_{21}\Phi = \lambda\Phi$. Mivel $P_{21}^2\Phi = \Phi = \lambda^2\Phi$,

láthatólag $\lambda = \pm 1$. Azokat a sajátvektorokat, amelyekre $\lambda = 1$ a szimmetrikus vektorok, azok pedig amelyekre -1 az antiszimmetrikusak. Vezessük be az

$$S = \frac{1}{2}(1 + P_{21}) \quad \text{és az} \quad A = \frac{1}{2}(1 - P_{21}) \quad (27.10)$$

antiszimmetrizáló operátorokat. Érvényesek a következő állítások S és A önadjungált és idempotens operátorok, tehát projekciók. Egymásra ortogonális alterekre vetítetnek, mert

$$SA = AS = 0 \quad (27.11)$$

Továbbá

$$P_{21}S = P_{21}\frac{1}{2}(1 + P_{21}) = S \quad (27.12)$$

illetve

$$P_{21}A = P_{21}\frac{1}{2}(1 - P_{21}) = -A. \quad (27.13)$$

Ezek a \mathcal{H} szimmetrikus illetve antiszimmetrikus alterei.

Vegyünk most egy tetszőleges vektort, alkalmazzuk rá S -t akkor ez P_{21} szimmetrikus sajátvektora, illetve A -t amely P_{21} antiszimmetrikus sajátvektora. Valóban

$$P_{21}S\Psi = S\Psi, \quad P_{21}A\Psi = -A\Psi \quad (27.14)$$

Továbbá a két tér direkt összege kiadja a teljes teret mert

$$S + A = 1, \quad (27.15)$$

ami másképpen azt jelenti, hogy tetszőleges kétrészecske állapot egyértelműen felbontható egy szimmetrikus és antiszimmetrikus állapot összegére:.

$$\Psi = \frac{1}{2}(1 + P_{21})\Psi + \frac{1}{2}(1 - P_{21})\Psi = \Psi_s + \Psi_a \quad (27.16)$$

ahol Ψ_s és Ψ_a ortogonálisak egymásra.

Bonyolultabb a helyzet akkor ha a részecskék száma N több mint 2. Ennek az esetnek a tárgyalásához földézzük a permutációk fogalmát. N db különböző objektum, az alábbiakban az első N természetes szám különböző lehetséges sorrendekbe való rendezését nevezzük permutációknak. Egy permutáció a következő

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & N \\ k_1 & k_2 & \dots & k_N \end{pmatrix} \quad (27.17)$$

vagy csak egyszerűen

$$(k_1 k_2 k \dots k_N) \quad (27.18)$$

ahol $(k_1 k_2 k \dots k_N)$ az első N szám egy más sorrendben való fölrírását jelenti. A lehetséges permutációk száma $N!$ és az egyes permutációkat α indexszel betűvel is fogjuk jelölni, ahol α valamilyen $(k_1 k_2 k \dots k_N)$ permutációt jelent. Ismeretes, hogy értelmezhetjük a permutációk kompozícióját vagy szorzatát és hogy a permutációk az algebrai értelemben csoportot alkotnak, amelyet szimmetrikus csoportnak nevezünk. Minden permutáció megadható mint párok fölcserélésének, más néven transzpozíciójának egymásutánja, azaz szorzata. Egy permutáció többféleképpen is előállítható transzpozíciók szorzataként, de egy adott N esetén minden permutáció két osztályba sorolható, a páros és a páratlan permutációk közé, azaz beszélhetünk a permutáció paritásáról. A páros permutációk azok, amelyeket az eredeti $(1, 2, 3 \dots N)$ sorozatból a számok páros számú fölcserélésével érhetünk el, míg páratlanok azok, amelyeknél ezen fölcserélések száma páratlan. Noha a fölcserélések száma mint említettük többféle is lehet, ezen számok paritása, azaz páros vagy páratlan volta egyértelműen meghatározott egy adott permutáció esetén. A páros és páratlan permutációk száma minden adott N esetén ugyanannyi: $N!/2$.

Ilyen módon minden α permutációhoz hozzárendelhetünk egy $\varepsilon_\alpha = (-1)^c$ számot, ahol c az $(1, 2, 3 \dots N)$ sorrendből az adott α permutáció eléréséhez szükséges cserék száma. $\varepsilon_\alpha = +1$, ha permutáció páros és $\varepsilon_\alpha = -1$ ha páratlan. Rendeljünk hozzá ezek után minden α permutációhoz egy P_α operátort a következőképpen

$$\alpha = (k_1 k_2 k \dots k_N) \longrightarrow P_{(k_1 k_2 k \dots k_N)} = P_\alpha \quad (27.19)$$

$$P_{(k_1 k_2 k \dots k_N)} \sum c_{i_1 i_2 \dots i_k} |u_{i_1} u_{i_2} \dots u_{i_N}\rangle = \sum c_{i_1 i_2 \dots i_k} |u_{i_{k_1}} u_{i_{k_2}} \dots u_{i_N}\rangle \quad (27.20)$$

Megmutatható, hogy a P_α operátorok unitérek de nem önadjungáltak. Ez utóbbi onnan látható, hogy két permutáció pl. két transzpozíció szorzata nem ugyanaz fordított sorrendben. A transzpozíciók önadjungáltak, szorzatuk viszont csak akkor, ha fölcserélhetők, s ez általában nem érvényes

Vezessük be az

$$S = \sum_\alpha P_\alpha \quad (27.21)$$

és az

$$A = \sum_\alpha \varepsilon_\alpha P_\alpha \quad (27.22)$$

operátorokat. Ezekről viszont megmutatható, hogy önadjungáltak és idempotensek,

tehát projekciók. S és A egymásra most is ortogonális, de összegük, az $N = 2$ kivételével nem adja ki az egységet. Az S operátor sajátvektorai alkotják a tenzorszozat tér teljesen szimmetrikus alterét, az A operátoré az antiszimmetrikus alteret. Vannak azonban olyan – ezekre ortogonális – alterek, amelyek sem nem szimmetrikusak sem nem antiszimmetrikusak, kivéve ha csak két részecskéről van szó.

A több részecskerendszerben értelmezett lineáris operátorok általános alakja $B(1, 2 \dots N)$ ahol a számok egyszerűen azt jelentik, hogy az operátor valamilyen módon hat az első a második stb. részecske koordinátáira (a koordináta szót itt most megfelelő általános értelemben értjük) Speciális esetként tekintjük a Hamilton operátort. Ha a részecskék azonosak, akkor a H operátor nem változhat, ha bármely két részecskét egymással fölcserélünk, s így akkor sem, ha azok bármely permutációját vesszük. Emiatt

$$\begin{aligned} P_\alpha H(1, 2, \dots, N) \Psi(1, 2, \dots, N) &= H(\alpha(1, 2, \dots, N)) \Psi(\alpha(1, 2, \dots, N)) = \\ &= H(1, 2, \dots, N) P_\alpha \Psi(1, 2, \dots, N) \end{aligned} \quad (27.23)$$

A fönti egyenlőségből látható, hogy a $H(1, 2, \dots, N)$ operátor fölcserélhető a P_α permutációs operátorokkal. Ezért a H -t és minden ilyen tulajdonsággal bíró operátort szimmetrikusnak nevezünk. Minden ilyen operátort szimmetrikusnak nevezünk. Most már kimondhatjuk a posztulátumot, amely föloldja a korábban látott kicserélődési degenerációt:

7. Posztulátum:

Több azonos részecskéből álló kvantumrendszer állapottere a $\mathcal{H} = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}$ tenzori szozat Hilbert térnek a részecskék fajtájától függően vagy a teljesen szimmetrikus vagy a teljesen antiszimmetrikus altere. Azokat a részecskéket amelyek állapottere a szimmetrikus alter bozonoknak (S. Bose indiai fizikus nevéből), amelyeké az antiszimmetrikus alter azokat fermionoknak (E. Fermi nevéből) nevezük. A tapasztalat szerint ha a kérdéses részecskék saját-impulzusmomentumát, spinjét egész j ($0, 1, 2 \dots$) kvantumszám adja meg, akkor a részecskék bozonok, ha pedig félegész j ($1/2, 3/2 \dots$) kvantumszám akkor fermionok.

$$|1 : p_z; 2 : -p_z\rangle \longrightarrow |1 : p_n; 2 : -p_n\rangle \quad (27.24)$$

vagy

$$|1 : p_z; 2 : -p_z\rangle \longrightarrow |1 : -p_n; 2 : p_n\rangle \quad (27.25)$$

Legyen az első folyamat amplitúdója $f(\vartheta)$ a másodiké akkor $f(\pi - \vartheta)$. Jelöljük az n irányban haladó részecske állapotát a -val a $-n$ irányba haladóét b -vel. ha szuperpozíció van és azonosak a részecskék, akkor az eredmény $\frac{1}{\sqrt{2}}(f(\vartheta) + f(\pi - \vartheta))$. Ha $\vartheta = \pi$

Tekintsük most a szakasz elején vizsgált feladatot a szórásról. A kezdeti állapot legyen az amikor az egyik részecske impulzusa p , a másiké $-p$. Ha a részecskék azonosak akkor a bejövő állapot $|\Phi_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \epsilon P_{21}) |p, -p\rangle$. A kimenő állapot pedig legyen $|\Phi_f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \epsilon P_{21}) |p', -p'\rangle$, ahol a fentiek szerint $\epsilon = 1$, ha a részecskék bozonok és $\epsilon = -1$, ha fermionok. Az ütközés során a bejövő állapot átalakulhat de a szimmetria tulajdonságok megmaradnak. A mérés előtt az állapot $|\Phi\rangle = U(t_1, t_0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \epsilon P_{21}) |\varphi, \psi\rangle$, ahol $U(t_1, t_0)$ az adott folyamathoz tartozó evolúciós operátor. Mivel két azonos részecskéről van szó, a Hamilton operátor s így az evolúciós operátor is szimmetrikus a részecskék fölcserélésére nézve, ezért U és P_{21} fölcserélhető. Az átmenet valószínűségi amplitúdója, azaz, hogy az egyik részecske éppen a p' , a másik a $-p'$ irányba repül

$$\langle \Phi_f | \Phi \rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \epsilon P_{21}) \langle p', -p' | U(t_1, t_0) \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \epsilon P_{21}) | p, p' \rangle \right\rangle \quad (27.26)$$

Kihasználva a P_{21} unitér voltát, továbbá, hogy $\epsilon^2 = 1$, kapjuk, hogy

$$\langle \Phi_f | \Phi \rangle = \frac{1}{2} \langle p', -p' | U(2 + 2\epsilon P_{21}) | p, p' \rangle = \langle p', -p' | U | p, -p \rangle + \epsilon \langle p', -p' | U | -p, p \rangle \quad (27.27)$$

Annak valószínűsége tehát, hogy az egyik részecske a p' , a másik a $-p'$ irányba repül:

$$|\langle p', -p' | U | p, -p \rangle + \epsilon \langle p', -p' | U | -p, p \rangle|^2 \quad (27.28)$$

Ez nyilvánvalóan függ ϵ -tól. Ha a részecskék megkülönböztethetők, akkor viszont az két megkülönböztethető esemény, hogy melyik részecske melyik detektorba ment. Ekkor annak a valószínűsége, hogy az első, p impulzusú részecske a p' irányba repül $|\langle p', -p' | U | p, -p \rangle|^2$, és ettől függetlenül bekövetkezhet az, hogy ugyanez a részecske a $-p'$ irányba repül, aminek a valószínűsége: $|\langle p', -p' | U | -p, p \rangle|^2$. A két folyamat elvileg megkülönbözthető. Ekkor annak a valószínűsége, hogy a detektorok jeleznek, a két valószínűség összege:

$$|\langle p', -p' | U | p, -p \rangle|^2 + |\langle p', -p' | U | -p, p \rangle|^2 \quad (27.29)$$

Legyen a szóródás polárszöge, azaz a részecskék eredeti impulzusának irányával

bezárt szög ϑ . Ha a kölcsönhatás a két részecske között gömbszimmetrikus, mint pl. töltött részecskék esetén a Coulomb potenciál, akkor a szóródás mértéke azonos minden ϕ azimutszög esetén. Vezessük be a $\langle p', -p' | U | p, -p \rangle = f(\vartheta)$ jelölést, amit szórási amplitúdónak nevezünk, ekkor szimmetria okok miatt $\langle p', -p' | U | -p, p \rangle = f(\pi - \vartheta)$. Annak a valószínűsége tehát, hogy a detektorok jeleznek különböző részecskék esetén:

$$\mathcal{P} = |f(\vartheta)|^2 + |f(\pi - \vartheta)|^2 \quad (27.30)$$

Míg ugyanez bozonok illetve fermionok esetén:

$$\mathcal{P} = |f(\vartheta) \pm f(\pi - \vartheta)|^2 \quad (27.31)$$

Különösen érdekes, ha a $\vartheta = \pi/2$ esetet nézzük, azaz amikor a részecskék éppen merőlegesen térülnek el. Az eredmény ekkor különböző részecskék esetén $2|f(\pi/2)|^2$ bozonok esetén $4|f(\pi/2)|^2$, míg fermionok esetén 0. Itt néhány megjegyzést kell még tennünk. Először is maga az $f(\vartheta)$ függ attól, hogy konkrétan milyen részecskékről van szó. Másodsor pedig az eredmény függ a szóródó részecskék relatív spinbeállásától. Ha a részecskék spinpolarizáltak és a kölcsönhatás olyan mint legtöbbször, hogy a spint nem változtatja, akkor, ha a szórás előtt a két részecske spinbeállása azonos akkor a részecskék valóban megkülönböztethetetlenek, tehát pl. elektronok esetén a szórási valószínűség merőleges irányba 0. Ha azonban a spinbeállítás ellentétes, s a kölcsönhatás spinfüggetlen, akkor a részecskék megkülönböztethetők a spinjük szerint s ekkor az eredmény ismét $2|f(\pi/2)|^2$. Polarizálatlan elektronnyaláb esetén pedig a lehetséges esetekre ($\uparrow\uparrow$, $\downarrow\downarrow$, $\uparrow\downarrow$, $\downarrow\uparrow$) $1/4-1/4$ valószínűséggel átlagolni kell, s ekkor az eredmény $|f(\pi/2)|^2$, azaz a megkülönböztethetlenségnek fizikailag mérhető következményei vannak.

27.1. Független részecskék

Sokszor előfordul, hogy egy sokrészecskerendszert úgy kezelünk, mintha az egyes részecskék között nem lenne kölcsönhatás. Ez egzakt például egy üregbeli elektromágneses mezőt reprezentáló fotonok esetén, amelyek között nincs kölcsönhatás. Sok esetben azonban közelítőleg igaznak tekinthető pl. elektronok vagy más részecskék esetében is, ha azok térfogati sűrűsége nem túlságosan nagy. Ekkor a fön-
 tiékből következően a többrészecskerendszerbeli állapotok egyrészecskeállapotok azaz az egyes Hilbert térbeli elemek tenzorszorzatainak speciális lineáris kombinációiként írhatók föl, mert van értelme külön külön egyrészecske állapotokról is

beszélni.

Vizsgáljuk először két részecske esetét. Tegyük föl hogy tudjuk, hogy két részecske esetén az egyik a $|\varphi\rangle$ a másik a $|\chi\rangle$ állapotban van, akkor a szimmetrizálási posztulátumnak megfelelő állapot bozonok esetén

$$\mathcal{N}(|\varphi\rangle|\chi\rangle + |\varphi\rangle|\chi\rangle) \quad (27.32)$$

fermionok esetén

$$\mathcal{N}(|\varphi\rangle|\chi\rangle - |\varphi\rangle|\chi\rangle) \quad (27.33)$$

ahol \mathcal{N} a normálási tényező, amely abban az esetben ha $|\varphi\rangle$ és $|\chi\rangle$ ortogonális éppen $1/\sqrt{2}$. Abban a speciális esetben, ha $|\varphi\rangle = |\chi\rangle$, a bozonokra a $|\varphi\rangle|\varphi\rangle$ az eredmény, amely nyilvánvalóan szimmetrikus, fermionokra viszont 0, azaz két fermion nem lehet ugyanabban az egyrészecske állapotban. Ezt nevezzük Pauli elvnek. N független részecske esetén ha az egyrészecske állapotok $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle \dots |\varphi_N\rangle$, akkor fermionok esetén a megfelelő teljes antiszimmetrikus állapot egy determináns:

$$\begin{vmatrix} |1 : \varphi_1\rangle & |2 : \varphi_1\rangle & \dots & |N : \varphi_1\rangle \\ |1 : \varphi_2\rangle & |2 : \varphi_2\rangle & \dots & |N : \varphi_2\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |1 : \varphi_N\rangle & |2 : \varphi_N\rangle & \dots & |N : \varphi_N\rangle \end{vmatrix} \quad (27.34)$$

amelyet Slater determinánsnak nevezünk. Ha ebben bármely két egyrészecske állapot megegyezik, akkor a determináns megfelelő sorai is megegyeznek, amiből következik, hogy a determináns 0, tehát ilyen állapot nem lehetséges. Ez ismét a Pauli elv, amely tehát a fermionokra vonatkozó antiszimmetrizálási posztulátum speciális esete.

Tekintsük most az N db független, tehát nem kölcsönható részecske $H(1, 2 \dots N)$ Hamilton operátorát. Mivel nincs kölcsönhatás, a H szükségképpen az egyes részecskék Hamilton operátorának összege:

$$H(1, 2 \dots N) = \sum_i^N h(i) \quad (27.35)$$

ahol minden $h(i) = h$ azonos alakú, mert a részecskék azonosak. Oldjuk meg h sajátértékproblémáját:

$$h|\varphi_k\rangle = \varepsilon_k|\varphi_k\rangle \quad (27.36)$$

Ekkor a teljes H sajátértékproblémájának megoldásai lesznek a $\Psi = |\varphi_{k_1}(1)\rangle |\varphi_{k_2}(2)\rangle \dots |\varphi_{k_N}(N)\rangle$ alakú vektorok a tenzori szorzattérben, ahol a $|\varphi_{k_j}(1)\rangle \equiv |1 : \varphi_{k_j}\rangle$ állapot valamilyen megoldása a fenti egyenletnek, és a H megfelelő energiasajátértékei $E = \varepsilon_{k_1} + \varepsilon_{k_2} + \dots + \varepsilon_{k_N}$. Ezek azonban általában nem teljesítik a szimmetria vagy antiszimmetria követelményét., ezért azokat szimmetrizálni vagy antiszimmetrizálni kell. Világos, hogy bármely P_α permutációt alkalmazva a Ψ vektorra az ismét ugyanezen E sajátértékhez tartozik.

A valódi sajátvektornak azonban vagy az S vagy az A operátor sajátvektorának is kell lennie, s ilyeneket úgy kaphatunk, ha a fenti Ψ -re alkalmazzuk az S illetve az A operátort. . függvény az $S\Psi$ illetve $A\Psi$ is, amelyek ezen kívül teljesítik a megfelelő szimmetrizálási posztulátumot.

Ennek alapján a bozonok esteében a független részecskékből álló sokrészecskerendszer legalacsonyabb együttes energiája egy olyan állapothoz tartozik, amelyben minden egyes részecske a legalacsonyabb itt ε_0 -lal jelölt energiájú $|\varphi_0(i)\rangle$ egyrészecske állapotban van, azaz a teljes Ψ állapot

$$\Psi = |\varphi_0(1), \varphi_0(2), \dots \varphi_0(N)\rangle \quad (27.37)$$

amely nyilvánvaéóan szimmetrikus, és a hozzá tartozó teljes energia $E = N\varepsilon_0$. Tömeggel rendelkező részecskék közül az alkáli atomok (Na, Rb) ritka gázában sikerült 1995-ben lényegében ilyen állapotot nagyon mély hőmérsékleten létrehozni, amit Bose-Einstein kondenzációnak nevezünk. Ez a gáz ilyenkor egy úgynevezett Bose-Einstein kondenzátum, amelynek létezését először Einstein jósolta meg 1925-ben.

A fermionok esetében a legalacsonyabb energiájú állapot egy főntebb látott olyan Slater determináns lesz, amelyben a $|\varphi_{k_j}\rangle$ állapotok mind különbözőek, de nem szükségképpen tartoznak különböző egyrészecske energiákhoz, mert az ε_k egyrészecske energiák elfajultak is lehetnek, s így különböző ortogonális állapotokban azonos energiával lehetnek a részecskék. Legyenek az ε_k sajátértékek növekedésük sorrendjében indexelve, azaz

$$\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_2 \dots, \quad (27.38)$$

és legyenek a megfelelő elfajultsági indexek g_0, g_1, g_2, \dots . Ekkor a legalacsonyabb teljes energia úgy valósul meg, hogy a részecskék e legalacsonyabb egyrészecske energiaértékkel bíró állapotokat töltik be, de ez legföljebb annyi részecskét jelenthet, ahányszor, ahányszor a kérdéses ε nivå elfajult. Így a teljes rendszer alapállapot

(legalacsonyabb) energiája

$$E_0 = g_0\varepsilon_0 + g_1\varepsilon_1 + \dots + g_{n-1}\varepsilon_{n-1} + (N - \sum_{k=0}^{n-1} g_k)\varepsilon_n, \quad (27.39)$$

ahol n az a legkisebb egész szám amelyre $g_0 + g_1 + \dots + g_n \geq N$.

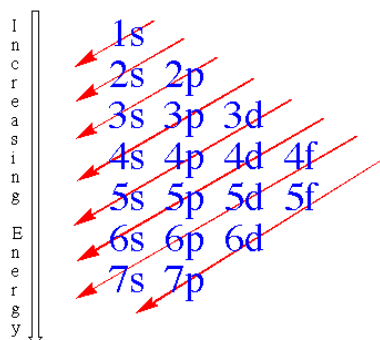
Ha a teljes rendszer alapállapotban van, azaz energiája E_0 , akkor a legmagasabb még betöltött állapothoz tartozó $\varepsilon_n = \varepsilon_F$ energiát Fermi enenergiának nevezzük, amely elsősorban a makroszkopikus szilárd testekben pl. fémekben és félvezetőkben mozgó elektronok viselkedésének leírásánál játszik fontos szerepet. Mivel ezekben az anyagokban szobahőmérsékleten $\varepsilon_F \gg kT$, ezért termikus okokból az összes elektron közül csak olyan számú gerjesztődik, ahány az ε_F vagy annál mintegy kT -vel kisebb energiával rendelkezik. Ez a szám egy makroszkopikus szilárd test esetén sok nagyságrenddel kisebb mint N , aminek a termikus tulajdonságok szempontjából érdekes következményei vannak. Erről részletesebben a statisztikus fizikai tanulmányok során lesz szó.

28. Többelektronos atomok

A korábbiakban láttuk, hogy az előforduló korrekciók miatt már a legegyszerűbb egy elektront tartalmazó atom a hidrogén spektruma is bonyolult finomszerkezetet mutat. Első közelítésben azonban a spektrum egyszerű, az energia csak az n főkvantumszámtól függ és ez az energiaérték $2n^2$ -szer degenerált.

A többelektronos atomok esetén szigorúan véve csak a sok elektron együttesének a mag terében létrejövő stacionárius állapotairól lehetne beszélni. Mégis az elektronok közötti kölcsönhatás ellenére, jó közelítéssel érvényes, hogy az atomban megfelelő pontossággal használható az egyes elektronok állapotának fogalma. Ezeket az egyelektron állapotokat pályáknak fogjuk nevezni, de ez nem jelent semmiféle klasszikus pályát. A teljes atom kvantumállapota ezen egyelektron állapotokból antiszimmetrizálás után kapható meg.

Az egyes elektronok a többi elektron és a mag terének gömbszimmetrikusnak tekinthető terében mozognak és így a pályák hasonlóan jellemezhetők mint a hidrogén állapotai. A pályákat tehát az n főkvantumszámmal és a pályaimpulzusmomentumukra jellemző ℓ mellékvantumszámmal jellemezzük. Az elektronok egymás közti taszítása azonban módosítja a többelektronos atomok energiaszintjeit, és megszünteti azt a Coulomb térben érvényes elfajulást, hogy egy



adott n főkvantumszámhoz tartozó n számú és különböző mellékvantumszámmal ($\ell = 0, 1, 2 \dots n - 1$) jelzett állapotok, azonos energiájúak. A mellékvantumszám értékétől függően ezeket az állapotokat az itt látható

$$\begin{array}{cccccc} \ell = & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & \dots \\ & s & p & d & f & g & \dots \end{array} \quad (28.1)$$

betűkkel szokás jelölni. Ezek szerint van szó $1s$, $2s$, $2p$, $3s$ stb pályákról, s ezek energiája már függ az ℓ értékétől is. Az atom azonban gömbszimmetrikus, ezért az adott n , ℓ -hez tartozó energiaérték még a pályaimpulzuszómomentum értékének valamely tengely (általában a z tengely) irányára tekintett vetülete (mágneses kvantumszám értéke) szerint $(2\ell + 1)$ -szer, az elektron saját feles spinje miatt pedig még kétszeresen, tehát együttesen $2(2\ell + 1)$ -szeresen degenerált. (A finomszerkezet stb. miatt valójában ezek között is van csekély energiakülönbség). Az atom lehetséges állapotait úgy kapjuk meg, hogy a *Pauli elvnek* megfelelően az egyelektron állapotokba egy-egy elektront teszünk

A H atomban a pályae energiák n növelésével nőnek és ℓ -től függetlenek. A többelektronos atomokra a helyzet kissé bonyolultabb, mert ℓ -től is függenek az energiák. Adott ℓ esetén a nagyobb n -hez nagyobb energia és adott n esetén szintén nagyobb ℓ -hez nagyobb energia tartozik. energiák szerint növekvő sorrend a következő:

$$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p \quad (28.2)$$

melyet az alábbi ábráról lehet leolvasni a nyilak mentén felülről lefelé haladva. Látható tehát, hogy a $3p$ után már nem a $3d$ hanem a $4s$ pálya betöltése következik,

ez a K és a Ca külső elektronhéja, amelynek kicsit kisebb az energiája, mint $3d$ pályáé stb.

Egy atom elektronkonfigurációján azt értjük, hogy az egyes pályákon illetve a hozzátartozó energián hány elektron található, am. Ha egy adott n -el és ℓ -lel jellemzett pályán több elektron van, akkor ezeket az ℓ -et jelző betű kitevőjeként írjuk. A H atom alapállapota $1s$ a He atomban lévő két elektron alapállapota $1s^2$ konfigurációnak felel meg. A He legelső gerjesztett állapota $1s2s$ konfigurációjú. A periódusos rendszer következő eleme a Li, 3 elektronnal, amelyek közül az alapállapot $1s^22s$ konfigurációnak felel meg, és ez folytatódik a 10-es rendszámú neonig, amelynek konfigurációja $1s^22s^22p^6$, mert a p pályákra legföljebb 6 elektron tehető a Pauli elv miatt.

29. Hamilton operátor külső elektromágneses mezőben

Külső mágneses térben mozgó töltés Lagrange függvénye nemrelativisztikus közelítésben

$$L = \frac{1}{2}mv^2 + q\mathbf{v}\mathbf{A} - q\Phi \quad (29.1)$$

Ebből következően a kanonikus impulzus $\mathbf{p} = m\mathbf{v} + q\mathbf{A}$, illetve a Hamilton függvény: $\mathcal{H} = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r},t))^2 + q\Phi(\mathbf{r},t)$

Külső mágneses mezőben mozgó töltés H operátora a megfelelő klasszikus \mathcal{H} függvény analógiájára:

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{P} - q\mathbf{A}(\mathbf{R},t))^2 + q\Phi(\mathbf{R},t) \quad (29.2)$$

ahol

$$\mathbf{P} = m\mathbf{V} + q\mathbf{A} \quad (29.3)$$

a kanonikus impulzus operátora, szemben az $m\mathbf{V} = \mathbf{P} - q\mathbf{A}$ kinetikus impulzussal. Így H első tagja lényegében $\frac{1}{2}m\mathbf{V}^2$ azonban, mivel mágneses mező jelenléte esetén \mathbf{A} szülségképpen helyfüggő a \mathbf{V} komponensei általában nem cserélhetők föl, mert ez az előírás a \mathbf{P} komponenseire érvényes. \mathbf{P} azonban csakúgy mint H mértékfüggő. Φ tartalmazhatja egy atomban az elektronra ható Coulomb vonzást a magtól és ezen kívül a külső tér potenciálját is.

Fejtsük ki a négyzetet és vegyük figyelembe, hogy \mathbf{P} és \mathbf{A} általában nem cserélhetők föl. $[P_i, A_j] = -i\hbar\partial_i A_j$. Speciálisan $\mathbf{P}\mathbf{A} - \mathbf{A}\mathbf{P} = P_i A_i - A_i P_i = -i\hbar\nabla\mathbf{A}$.

Így Coulomb mérték esetén fölcserélhetők.

Ez az eset, ha a mező homogén. Ekkor ui. \mathbf{A} választható a következő alakban:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{R}. \quad (29.4)$$

Ez a szimmetrikus mérték, de szokás másfajta mértékeket használni. A fenti \mathbf{A} divergenciája eltűnik. Ekkor a 29.2 első tagjában a négyzetre emelést elvégezve:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}\mathbf{P}^2 - \frac{1}{m}q\mathbf{P}\mathbf{A} + \frac{1}{2m}q^2\mathbf{A}^2 + q\Phi \\ &= \frac{1}{2m}P^2 + q\Phi - \frac{1}{2m}q(\mathbf{B} \times \mathbf{R})\mathbf{P} + \frac{1}{8m}q^2(\mathbf{B} \times \mathbf{R})^2 \\ &= H_0 + H_1 + H_2 \end{aligned} \quad (29.5)$$

ahol

$$H_0 = \frac{1}{2m}P^2 + q\Phi \quad (29.6)$$

a Hamilton operátor mágneses mező nélkül,

$$H_1 = -\frac{q}{2m}(\mathbf{B} \times \mathbf{R})\mathbf{P} = -\frac{q}{2m}\mathbf{B}(\mathbf{R} \times \mathbf{P}) = -\frac{q}{2m}\mathbf{L}\mathbf{B} \quad (29.7)$$

a \mathbf{B} -vel arányos korrekció, amely a töltés impulzusnyomatékával arányos, és

$$H_2 = \frac{1}{8m}q^2(\mathbf{B} \times \mathbf{R})^2 = \frac{1}{8m}q^2(\mathbf{R}^2\mathbf{B}^2 - (\mathbf{R}\mathbf{B})^2) \quad (29.8)$$

amely \mathbf{B} -ben kvadratikus. H_1 neve paramágneses tag, míg H_2 -é diamágneses tag.

Az elnevezés oka következő. Tekintsünk egy klasszikus árameloszlást, amelynek elektromos áramsűrűsége \mathbf{j} . Az elektrodinamika szerint ennek mágneses momentuma

$$\mathbf{m} = \frac{1}{2} \int \mathbf{r} \times \mathbf{j} dV \quad (29.9)$$

Mint ismert, ebből a definícióból következik, hogy pl. egy köráram mágneses momentuma $I\mathbf{f}\mathbf{n}$, továbbá, hogy pontszerű töltés esetén

$$\mathbf{m} = \frac{q}{2}(\mathbf{r} \times \mathbf{v}) = \frac{q}{2m}\mathbf{r} \times m\mathbf{v} = \frac{q}{2m}\lambda, \quad (29.10)$$

ahol λ a kinetikai impulzus momentum. Mágneses tér jelenlétében λ különbözik az \mathcal{L} impulzusmomentumtól, mert az utóbbi az $\vec{\mathcal{L}} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ definíció szerint a kanonikus impulzus momentuma. Megjegyezzük közbevetőleg, hogy az $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$ kvan-

tummechanikai impulzusmomentum, ez utóbbinak felel meg, mivel az $[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$ fölcserélési relációk (azok, amelyekkel az impulzusmomentumot bevezettük) ebből a definícióból és a \mathbf{P} komponenseinek fölcserélhetőségéből következnek.

Fejezzük ki a mágneses momentumot az impulzusmomentummal.

$$\mathbf{m} = \frac{q}{2m}\mathbf{r} \times m\mathbf{v} = \frac{q}{2m}(\mathbf{r} \times (\mathbf{p} - q\mathbf{A})) = \frac{q}{2m}(\mathbf{r} \times \mathbf{p} - \mathbf{r} \times q\mathbf{A}) \quad (29.11)$$

homogén tér esetén a választott mértékkel $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$ a következő:

$$\mathbf{m} = \frac{q}{2m}\lambda = \frac{1}{2m}\mathbf{r} \times m\mathbf{v} = \frac{q}{2m}(\mathbf{r} \times \mathbf{p} - \mathbf{r} \times q\mathbf{A}) = \frac{q}{2m}(\mathcal{L} - \frac{q}{2}\mathbf{r} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{r})) \quad (29.12)$$

A zárójel első tagja éppen az impulzusmomentum, a második tag pedig homogén tér esetén $\frac{q^2}{4m}\mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \mathbf{B}) = \frac{q^2}{4m}[\mathbf{r}(\mathbf{r}\mathbf{B}) - r^2\mathbf{B}]$. A μ mágneses momentum energiája ha azt \mathbf{B} külső térbe helyezzük

$$W = - \int_0^B \mathbf{m}(B')dB' = -\frac{q}{2m}\mathcal{L}\mathbf{B} + \frac{q^2}{8m}[r^2B^2 - (\mathbf{r}\mathbf{B})(\mathbf{r}\mathbf{B})] \quad (29.13)$$

Látható, hogy a kvantummechanikai H ezen tagok kvantumos megfelelőiből áll. Az első tag csak akkor van jelen, ha a töltés pályaimpulzusmomentuma \mathbf{L} nem nulla, és a hozzá tartozó energia függ töltés előjelétől. A második tag mindig pozitív, és akkor is jelen van, ha a töltésnek nincs impulzusmomentuma. Ez amiatt lép föl, hogy a \mathbf{B} mágneses tér indukál egy mágneses momentumot és azzal kölcsönhat.

A paramágneses tag 10 T mágneses térerősség esetén kb négy nagyságrenddel kisebb fölhasadást okoz a spektrumban m különböző értékei miatt mint a spektrumvonalak közötti távolság mágneses mező nélkül. A diamágneses tag ennél még négy nagyságrenddel kisebb tehát csak akkor figyelhető meg, ha a paramágneses tag nincs jelen. A fenti képet bonyolítja, hogy valójában a z elektronok spinjéhez csatolt mágneses momentum is kölcsönhat a külső mágneses mezővel, de ezzel itt nem foglalkozunk.

30. A normális Zeeman effektus

30.1. Az energianívók fölhasadása

A Coulomb potenciál energiasajátértékproblémájának megoldásai a következők:

$$H_0|\psi_{n,\ell,m}\rangle = \varepsilon_n|\psi_{n,\ell,m}\rangle \quad (30.1)$$

$$L|\psi_{n,\ell,m}\rangle = \hbar^2\ell(\ell+1)|\psi_{n,\ell,m}\rangle \quad (30.2)$$

$$L_z|\psi_{n,\ell,m}\rangle = \hbar m|\psi_{n,\ell,m}\rangle \quad (30.3)$$

ahol $\varepsilon_n = -1/n^2$ Ry.

Tegyük föl, hogy az atomot \mathbf{B} külső homogén mágneses mezőbe helyezzük, legyen ennek iránya a z tengely iránya: $\mathbf{B} = (0,0,B)$

Ebben az esetben az energia operátora első közelítésben (és az elektron spinjét figyelmen kívül hagyva) : $H = H_0 - \mathfrak{M}\mathbf{B} = H_0 - \mathfrak{M}_z B_z = H_0 - \frac{q}{2m_e} L_z B = H_0 - \frac{q\hbar}{2m_e} \frac{L_z}{\hbar} B$

A második tagban az átalakítás nyomán az $\frac{L_z}{\hbar}$ dimenziótlan mennyiség és a $\frac{q\hbar}{2m_e}$ mennyiség szorzata jelentkezik. Ez utóbbit, amelyben az elektron tömege, töltése és a \hbar Planck állandó szerepel, és amelynek dimenziója mágneses momentum Bohr magnetonnak nevezzük, ez jellemzi az elektron és egy külső mágneses mező csatolódásának erősségét. A Bohr magneton számszerű értéke:

$$\mu_B = \frac{q\hbar}{2m_e} = -9.27 \times 10^{-24} \text{Joule/Tesla}$$

A H_0 helyett $H = H_0 - \frac{\mu_B}{\hbar} L_z$ a Hamilton operátor, de az az érdekes speciális és egyszerű eset áll itt fenn, hogy a H_0 sajátvektorai a H -nak is sajátvektorai

$$(H_0 - \frac{\mu_B}{\hbar} L_z B)|\psi_{n,\ell,m}\rangle = (\varepsilon_n - \mu_B m B)|\psi_{n,\ell,m}\rangle = (\varepsilon_n + \hbar\omega_L m)|\psi_{n,\ell,m}\rangle$$

ahol

$$\omega_L = -\mu_B B/\hbar = -\frac{q}{2m_e} B \quad (30.4)$$

neve Larmor frekvencia (az un. ciklotronfrekvencia fele).

Ez ahhoz vezet, hogy mágneses mezőben azok az energianívók, állapotok, amelyekre $\ell \neq 0$, tehát van $m \neq 0$ val jellemzett állapotuk felhasadnak $2\ell + 1$ alnívóra. Ennek következtében új Bohr frekvenciák jelennek meg, a megfigyelt spektrumvonalak felhasadnak. Ez a Zeeman effektus kvantummechanikai magyarázata.

30.2. A spektrumvonalak intenzitása és polarizációja

Vizsgáljuk meg külső mágneses térben milyen módon sugároz az atom. Ha nem megyünk bele a sugárzás kvantumelméletébe, akkor sugárzás akkor van, ha a

rendszer két stacionárius állapot szuperpozíciójában van és ott a dipólmomentum operátor várható értéke nem nulla. A dipólmomentum operátor alakja $\mathbf{D} = q\mathbf{R}$. Először is megmutatjuk, hogy \mathbf{R} illetve \mathbf{D} diagonális mátrixelemei a H_0 s így H sajátállapotain nullák: $\langle \psi | \mathbf{D} | \psi \rangle = 0$. Ennek oka az, hogy a mivel a paritás és H fölcserélhető. H -nak vannak olyan sajátvektorai amelyek határozott paritásúak, azaz a paritás operátor sajátállapotai. s mint tudjuk $|\psi_{n,\ell,m}\rangle$ -ek ilyenek, hiszen $\Pi|\psi\rangle = (-1)^\ell|\psi\rangle$. Másrészt viszont a paritás definíciójából következik, hogy ugyanakkor $\Pi\mathbf{R} + \mathbf{R}\Pi = 0$, azaz a paritás és a koordinátavektor antikommutálnak. Így mivel Π önadjungált

$$0 = \langle \psi | \Pi\mathbf{R} + \mathbf{R}\Pi | \psi \rangle = \pm \langle \psi | \mathbf{R} | \psi \rangle \pm \langle \psi | \mathbf{R} | \psi \rangle \quad (30.5)$$

amiből következik, hogy $\pm 2\langle \psi | \mathbf{R} | \psi \rangle = 0$, azaz $\langle \psi | \mathbf{R} | \psi \rangle = 0$. Teljesen hasonlóan, a paritás operátorral való antikommutátor eltűnéséből az is megmutatható, hogy \mathbf{R} azon mátrixelemei, amelyeknél a két vektor ℓ -je páros számban különbözik, szintén eltűnnek. Valójában ennél sokkal szigorúbb megkötés is fennáll: \mathbf{R} mátrixelemei közül csak azok nem tűnnek el, amelyekre $\Delta\ell = \pm 1$. (Ez a kiválasztási szabály az \mathbf{R} illetve a ψ állapotok forgatásokkal szemben való viselkedéséből következik, de ezt itt most nem tárgyaljuk, mert alább csak az $n = 1$ és $n = 2$ energiaszintek közötti átmenethez tartozó vonalakat vizsgáljuk, amikor is legfőljebb $\Delta\ell = \pm 1$ lehet.) Ezek szerint az alapállapot $|\psi_{100}\rangle$ csak a $|\psi_{21m}\rangle$ állapotokkal lehet dipólc-satolásban. Tekintsük tehát a

$$|\Psi(t)\rangle = c_1|\psi_{100}\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t} + c_2|\psi_{21m}\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2+m\hbar\omega_L)t/\hbar} \quad (30.6)$$

általában időfüggő szuperpozíciót, és számítsuk ki ebben az állapotban a \mathbf{D} operátor várható értékét. Bevezetve a $\Omega = (E_2 - E_1)/\hbar$ jelölést, amely a \mathbf{B} nélküli esetben az alapállapotból az első gerjesztett állapotba való átmenetnek megfelelő körfrekvencia, az úgynevezett rezonanciavonal vagy másnéven Lyman $K\alpha$ vonal körfrekvenciája, a dipólmomentum várható értékére a

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \mathbf{D} | \Psi \rangle &= |c_1|^2 \langle \psi_{100} | \mathbf{D} | \psi_{100} \rangle + |c_2|^2 \langle \psi_{21m} | \mathbf{D} | \psi_{21m} \rangle + \\ &+ c_1^* c_2 \langle \psi_{100} | \mathbf{D} | \psi_{21m} \rangle e^{-i(\Omega+m\omega_L)t} + c_1 c_2^* \langle \psi_{21m} | \mathbf{D} | \psi_{100} \rangle e^{i(\Omega+m\omega_L)t} \end{aligned} \quad (30.7)$$

eredményt kapjuk. Ebben a kifejezésben az első két tag a fentebbiek szerint

eltűnik, a másik kettő egymásnak komplex konjugáltja, így

$$\begin{aligned}\langle \Psi | \mathbf{D} | \Psi \rangle &= 2 \operatorname{Re} \{ c_2^* c_1 \langle \psi_{21m} | \mathbf{D} | \psi_{100} \rangle e^{i(\Omega + m\omega_L)t} \} = \\ &= 2 |c_2^* c_1| \operatorname{Re} \{ \langle \psi_{21m} | \mathbf{R} | \psi_{100} \rangle e^{i(\Omega + m\omega_L)t + i\gamma} \}\end{aligned}\quad (30.8)$$

ahol $c_2^* c_1 = |c_2^* c_1| e^{i\gamma}$. A \mathbf{D} operátor tulajdonképpen három operátor összege $\mathbf{D} = q\mathbf{R} = q(\hat{\mathbf{x}}X + \hat{\mathbf{y}}Y + \hat{\mathbf{z}}Z)$ ahol $\hat{\mathbf{x}}$, $\hat{\mathbf{y}}$ és $\hat{\mathbf{z}}$ a megfelelő irányú egységvektorok. Az itt szereplő X , Y , Z operátorok mátrixelemeinek kiszámításához idézzük föl a koordinátaoperátor komponenseinek és az impulzusmomentum komponensek fölcserélési relációit: $[L_i, X_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}X_k$.

Ezek közül először vizsgáljuk meg Z -t, mivel a $|\psi_{21m}\rangle$ az L_z sajátvektorai. Mivel $[L, Z] = 0$ így tetszőleges m és m' re

$$0 = \langle \psi_{n'\ell'm'} | L_z Z - Z L_z | \psi_{n\ell m} \rangle = (m' - m) \langle \psi_{n'\ell'm'} | Z | \psi_{n\ell m} \rangle \quad (30.9)$$

így Z mátrixelemeinek olyan állapotok között amelyekre $(m' - m) \neq 0$ el kell tűnniük, azaz Z -nek csak a $\langle \psi_{210} | Z | \psi_{100} \rangle$ mátrixeleme nem tűnhet el, az $m = \pm 1$ es tag viszont nem szerepelhet, azaz egy kiválasztási szabályt nyertünk D_z -re. Azért, hogy egy hasonló trükköt alkalmazhassunk a teljes dipólmomentum operátorra, vezessük be a

$$X_+ = \frac{X + iY}{\sqrt{2}}, \quad X_- = \frac{X - iY}{\sqrt{2}} \quad (30.10)$$

operátorokat, amelyek egymás adjungáltjai és írjuk \mathbf{D} -t a

$$\mathbf{D} = q(\hat{\mathbf{x}}X + \hat{\mathbf{y}}Y + \hat{\mathbf{z}}Z) = q\left(\frac{\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}}}{\sqrt{2}}X_+ + \frac{\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}}}{\sqrt{2}}X_- + \hat{\mathbf{z}}Z\right) \quad (30.11)$$

alakba, mert a $|\psi_{n\ell m}\rangle$ bázisban az X_+ és X_- operátorokra kapunk egyszerű kiválasztási szabályokat, ugyanis mint az $[L_i, X_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}X_k$ alapján egyszerűen ellenőrizhető

$$[L_z, X_\pm] = \pm\hbar X_\pm \quad (30.12)$$

s így általában az L_z tetszőleges sajátvektorai között

$$\pm \langle \psi_{n'\ell'm'} | X_\pm | \psi_{n\ell m} \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle \psi_{n'\ell'm'} | L_z X_\pm - X_\pm L_z | \psi_{n\ell m} \rangle = (m' - m) \langle \psi_{n'\ell'm'} | X_\pm | \psi_{n\ell m} \rangle, \quad (30.13)$$

amiből következik, hogy

$$\langle \psi_{n' \ell' m'} | X_{\pm} | \psi_{n \ell m} \rangle \neq 0 \quad \text{csak akkor ha } m' = m \pm 1. \quad (30.14)$$

Ez azt jelenti, hogy \mathbf{D} -ből az X_+ -os tagnak csak a $\langle \psi_{211} | X_+ | \psi_{100} \rangle$ mátrixeleme nem tűnik csak el, az X_- -t tartalmazó tagból csak $\langle \psi_{21-1} | X_- | \psi_{100} \rangle$ a Z -s nek pedig csak a $\langle \psi_{210} | Z | \psi_{100} \rangle$ mátrixeleme vagyis

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \mathbf{D} | \Psi \rangle &= q2Re\{c_2^*c_1\{\langle \psi_{211} | X_+ | \psi_{100} \rangle e^{i(\Omega+\omega_L)t}(\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}})/\sqrt{2} \\ &+ \langle \psi_{21-1} | X_- | \psi_{100} \rangle e^{i(\Omega-\omega_L)t}(\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}})/\sqrt{2} + \langle \psi_{210} | Z | \psi_{100} \rangle i\Omega t \hat{\mathbf{z}}\} \end{aligned} \quad (30.15)$$

A mátrixelemek kiszámításához koordinátareprezentációt, és azon belül gömbi koordinátákat használunk. Ebben

$$\begin{aligned} \langle \psi_{21\pm 1} | X_{\pm} | \psi_{100} \rangle &= \int \psi_{21\pm 1}^*(r) \frac{r \sin \theta e^{\pm i\phi}}{\sqrt{2}} \psi_{100}(r) r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = \\ &= \int R_{21}(r) R_{10}(r) r^3 dr \int Y_1^{\pm 1*}(\theta, \phi) \frac{e^{\pm i\phi}}{\sqrt{2}} Y_0^0(\theta, \phi) \sin^2 \theta d\theta d\phi \end{aligned} \quad (30.16)$$

$$\begin{aligned} \langle \psi_{210} | Z | \psi_{100} \rangle &= \int \psi_{210}^*(r) r \cos \theta \psi_{100}(r) r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = \\ &= \int R_{21}(r) R_{10}(r) r^3 dr \int Y_1^{0*}(\theta, \phi) Y_0^0(\theta, \phi) \cos^2 \theta \sin \theta d\theta d\phi \end{aligned} \quad (30.17)$$

Az első faktor – azaz az r szerinti integrál – a fenti formulákban ugyanaz, mivel ezek csak n -től és ℓ -től függenek, s így mindhárom esetben ugyanakkora értéket adnak. Jelöljük ennek az integrálnak az értékét a -val. Az irányfüggő részek integráljai pedig a gömbfüggvények behelyettesítése után az X_+ , X_- és Z mátrixelemeiben rendre $-1/\sqrt{3}$, $1/\sqrt{3}$, $1/\sqrt{3}$ -at adnak. Itt megjegyezzük, hogy az a tény, hogy a (30.10) szerint definiált operátorok és a Z mátrixelemei azonos abszolút értékűek egy mélyebb tétel következményei. A föllépő konstansokat összefoglalva a $2|c_2^*c_1|qa/\sqrt{3} = d_0$ jelöléssel, amely dipólmomentum dimenziójú, és a γ fázisállandót nullának rögzítve kapjuk, hogy a dipólmomentum várható értéke:

$$\langle \Psi | \mathbf{D} | \Psi \rangle = d_0\{-\hat{\mathbf{x}} \cos(\Omega + \omega_L)t - \hat{\mathbf{y}} \sin(\Omega + \omega_L)t\}/\sqrt{2} + \quad (30.18)$$

$$+ d_0\{\hat{\mathbf{x}} \cos(\Omega - \omega_L)t - \hat{\mathbf{y}} \sin(\Omega - \omega_L)t\}/\sqrt{2} + \hat{\mathbf{z}}d_0 \cos \Omega t \quad (30.19)$$

Az első tag a $\hat{\mathbf{z}}$ irányba nézve jobbra forog, a második balra, a harmadik a $\hat{\mathbf{z}}$

irányba rezeg. Ezért a $\hat{\mathbf{z}}$ irányból, azaz a mágneses tér irányából nézve nincs Ω körfrekvenciájú sugárzás, mert a dipól saját irányából nem sugároz, csak két ellentétesen cirkulárisan poláros fény $\Omega + \omega_L$ illetve $\Omega - \omega_L$ körfrekvenciával. A \mathbf{B} -re merőleges irányban viszont három vonal van, az $\Omega \pm \omega_L$ esek a \mathbf{B} -re merőleges polarizációval, míg az Ω -s a \mathbf{B} -vel párhuzamos polarizációval és az utóbbi kétszer olyan intenzív, mert az intenzitás a dipólmomentum amplitúdójának négyzetével arányos, lásd elektrodinamika.

31. Stacionárius perturbációszámítás

A kvantummechanikában láttuk, hogy igen lényeges a H Hamilton operátor sajátértékeinek meghatározása. Ez azonban a legtöbb esetben közvetlenül nem lehetséges. Gyakran előfordul azonban, hogy a kérdéses H "közel van" valamilyen már ismert spektrummal rendelkező H_0 operátorhoz. Ekkor a feladat az, hogy meghatározzuk a

$$H = H_0 + W \quad (31.1)$$

alakú Hamilton operátor sajátértékeit és sajátvektorait, ahol H_0 sajátértékei és sajátvektorai ismertek, W pedig valamilyen értelemben egy kis korrekció, zavar, másnéven perturbáció a H_0 -hoz képest. Legyen H_0 ismertnek föltételezett spektruma diszkrét

$$H_0|\varphi_p^i\rangle = E_p|\varphi_p^i\rangle \quad (31.2)$$

ahol p indexeli az energiasajátértékeket, i pedig egy degenerációs index, és $|\varphi_p^i\rangle$ egy teljes ortonormált rendszer.

$$\langle\varphi_{p'}^{i'}|\varphi_p^i\rangle = \delta_{pp'}\delta_{ii'} \quad \sum_{ip} |\varphi_p^i\rangle \langle\varphi_p^i| = 1 \quad (31.3)$$

Föltesszük, hogy $W = \lambda\hat{W}$ alakú, ahol λ valós szám, az úgynevezett perturbációs paraméter. Keressük a $H(\lambda) = H_0 + \lambda\hat{W}$ spektrumát, azaz a

$$H(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle \quad (31.4)$$

egyenlet megoldását ahol föltételezzük, hogy $\lambda \rightarrow 0$ esetén $E(\lambda)$ folytonosan tart valamelyik E_p -hez, amelyik H_0 spektrumának diszkrét részéhez tartozik. A folytonos spektrum perturbációjával amely másfajta eljárást kíván itt nem foglalkozunk. A követelmény, hogy $\lambda \rightarrow 0$ esetén $E(\lambda)$ tartson H_0 valamely sajátértékéhez nem

mindig teljesül, s ha ez az utóbbi helyzet áll fenn, akkor a perturbációszámítás itt ismertetett módja nem használható. A föltételezés szerint $E(\lambda)$ és $|\psi(\lambda)\rangle$ sorba fejthető λ hatványai szerint:

$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \dots \quad (31.5)$$

$$|\psi(\lambda)\rangle = |0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle + \dots \quad (31.6)$$

Feladatunk ezeknek az ε_q és $|q\rangle$ korrekcióknak a meghatározása. Helyettesítsük be ezeket az sorokat a H sajátérték problémájába, kapjuk, hogy

$$(H_0 + \lambda\hat{W}) \left[\sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |q\rangle \right] = \left[\sum_{q'=0}^{\infty} \lambda^{q'} \varepsilon_{q'} \right] \left[\sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |q\rangle \right] \quad (31.7)$$

Tekintsük az egyenlőség két oldalát λ különböző hatványai szerint és redukáljuk 0-ra az egyenleteket.

$$H_0|0\rangle = \varepsilon_0|0\rangle \quad (31.8)$$

$$(H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + (\hat{W} - \varepsilon_1)|0\rangle = 0 \quad (31.9)$$

$$(H_0 - \varepsilon_0)|2\rangle + (\hat{W} - \varepsilon_1)|1\rangle - \varepsilon_2|0\rangle = 0 \quad (31.10)$$

$$\vdots \quad (31.11)$$

$$(H_0 - \varepsilon_0)|q\rangle + (\hat{W} - \varepsilon_1)|q-1\rangle \dots - \varepsilon_q|0\rangle = 0 \quad (31.12)$$

A 31.4 egyenlet a sajátvektorokat még ha a $\langle\psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = 1$ normálást meg is követeljük, ez is csak egy egységnyi abszolút értékű komplex állandó erejéig határozza meg a $|\psi(\lambda)\rangle$ -t. Ezért előírhatjuk, hogy $\langle 0|\psi(\lambda)\rangle$ legyen valós. Nulladrendben ebből az is következik, hogy $|0\rangle$ is legyen normált

$$\langle 0|0\rangle = 1 \quad (31.13)$$

a fáisa viszont egyelőre tetszőleges. A normálásból első rendig

$$\langle\psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = \langle 0|0\rangle + \lambda(\langle 1|0\rangle + \langle 0|1\rangle) + O(\lambda^2) \quad (31.14)$$

A $\langle 0|\psi(\lambda)\rangle$ valós követelményből első rendben következik, hogy $\langle 0|1\rangle$ valós, de ekkor $\langle 1|0\rangle$ is valós és a normálásból pedig $\langle 1|0\rangle + \langle 0|1\rangle = 0$, ami miatt

$$\langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0 \quad (31.15)$$

Hasonló okoskodással

$$\langle 2|0\rangle = \langle 0|2\rangle = -\frac{1}{2}\langle 1|1\rangle \quad (31.16)$$

A 31.8-ból következik, hogy $|0\rangle$ a H_0 -nak sajátvektora ε_0 sajátértékkel, azaz ε_0 a H_0 spektrumához tartozik. Most választunk egy speciális ε_0 -t legyen ez E_n^0 .

$$\varepsilon_0 = E_n^0. \quad (31.17)$$

Nyilvánvalóan több olyan $E(\lambda)$ lehet, amelyik E_n^0 -hoz tart annyi ahányszor az E_n^0 degenerált. A perturbáció hatásának vizsgálatakor megkülönböztetjük a nemdegenerált és a degenerált esetet.

31.1. Nemdegenerált nívó perturbációja

Legyen $\varepsilon_0 = E_n^0$ nemdegenerált. Ekkor ehhez H_0 -nak egyetlen sajátvektora tartozik, amely 31.2 szerint egy konstans szorzó erejéig $|\varphi_n\rangle$, és amelyet úgy választunk, hogy

$$|0\rangle = |\varphi_n\rangle \quad (31.18)$$

A következőkben első két rendig kiszámítjuk az energia és az állapot korrekcióit.

31.1.1. Elsőrendű korrekciók

Az elsőrendű korrekciót energiában úgy kapjuk, ha a 31.9 egyenletet rávetítjük $|\varphi_n\rangle$ -re:

$$\langle \varphi_n | (H_0 - \varepsilon_0) | 1 \rangle + \langle \varphi_n | (\hat{W} - \varepsilon_1) | 0 \rangle = 0 \quad (31.19)$$

Itt az első tag 0 mert H_0 önadjungált és a $H_0|\varphi_n\rangle = \varepsilon_0|\varphi_n\rangle$. A második tagból pedig

$$\varepsilon_1 = \langle \varphi_n | (\hat{W}) | \varphi_n \rangle \quad (31.20)$$

Az elsőrendű korrekció $\lambda\varepsilon_1 = \langle \varphi_n | (W) | \varphi_n \rangle$, s így az n -edik energianívó értéke első rendig:

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \langle \varphi_n | (W) | \varphi_n \rangle \quad (31.21)$$

Fontos és egyszerű eredményünk szerint tehát nemdegenerált esetben az elsőrendű korrekció a perturbáló operátor várható értéke a megfelelő nemperturbált sajátállapotban A 31.19-ban kiszámított projekció nyilván nem nyújtja az összes információt amit 31.9 nyújt, hiszen azt H_0 többi sajátvektorára is vetíthetjük. Most ezt tesszük és tekintjük a projekciót a többi $|\varphi_p^i\rangle$ sajátvektorra, amelyek lehetnek degeneráltak (ezért tartjuk meg a az i felső indexet itt)

$$\langle \varphi_p^i | (H_0 - \varepsilon_0) | 1 \rangle + \langle \varphi_p^i | (\hat{W} - \varepsilon_1) | 0 \rangle = 0 \quad |\varphi_p^i\rangle \neq |\varphi_n\rangle \quad (31.22)$$

Az első tagban most is használhatjuk, hogy $|\varphi_p^i\rangle$ sajátvektor így abból $(E_p^0 - \varepsilon_0) \langle \varphi_p^i | 1 \rangle$ adódik, a második tagban az ε_1 -et tartalmazó szorzat tűnik el, mert $\varepsilon_1 \langle \varphi_p^i | 0 \rangle$ -ben a két vektor belső szorzata eltűnik, mivel a H_0 különböző sajátértékeihez tartozó vektorokról van szó. Így átrendezés után a

$$\langle \varphi_p^i | 1 \rangle = \frac{1}{E_n^0 - E_p^0} \langle \varphi_p^i | \hat{W} | 0 \rangle \quad p \neq n \quad (31.23)$$

eredményt kapjuk. Ez megadja $|1\rangle$ vetületét H_0 összes sajátvektorára kivéve $|\varphi_n\rangle$ -re, de ez utóbbiról tudjuk, hogy $\langle \varphi_n | 1 \rangle = \langle 0 | 1 \rangle = 0$ 31.15 szerint. Azaz ismerjük $|1\rangle$ komponenseit a teljes $|\varphi_p^i\rangle$ ortonormált rendszeren, tehát magát $|1\rangle$ -et is:

$$|1\rangle = \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{1}{E_n^0 - E_p^0} \langle \varphi_p^i | \hat{W} | 0 \rangle |\varphi_p^i\rangle |\varphi_p^i\rangle \quad (31.24)$$

tehát a sajátvektor elsőrendig a fenti összefüggést λ -val szorozva és hozzáadva $|\varphi_n\rangle = |0\rangle$ -hoz:

$$|\psi(\lambda)\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{|\varphi_p^i\rangle}{E_n^0 - E_p^0} \langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle. \quad (31.25)$$

A sajátvektorkorrekciójában tehát megjelenik az összes olyan $|\varphi_p^i\rangle$ lineáris kombinációja, amelyre a $\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle$ mátrixelem nem tűnik el. Azt szokás mondani, hogy a perturbáció $|\varphi_n\rangle$ -hez hozzákeveri H többi sajátvektorát. Most már az is látható, hogy ahhoz, hogy a korrekció kicsi legyen az szükséges, hogy a $\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle$ mátrixelem legyen kicsi a $E_p^0 - E_n^0$ energiadifferenciákhoz képest. Azaz a perturbációs közelítés annál jobb minél messzebb van a kiválasztott energianívó az összes többitől.

31.1.2. Másodrendű korrekció

Most a 31.10 összefüggésből indulunk és ahasonló eljárást követünk mint az elsőrendű esetben. Rávetítjük az említett egyenletet a $|\varphi_n\rangle$ -re

$$\langle \varphi_n | (H_0 - \varepsilon_0) | 2 \rangle + \langle \varphi_n | (\hat{W} - \varepsilon_1) | 1 \rangle - \langle \varphi_n | 0 \rangle = 0 \quad (31.26)$$

Az első tag ismét eltűnik mert H_0 -t a tőle balra álló φ_n -re átvéve ismét $\varepsilon_0 |\varphi_n\rangle$ adódik. A második tagban a $\langle \varphi_n | \varepsilon_1 | 1 \rangle = \varepsilon_1 \langle 0 | 1 \rangle$ tag eltűnik 31.15 miatt, a harmadik tag pedig éppen ε_2 . Így kapjuk, hogy

$$\varepsilon_2 = \langle \varphi_n | \hat{W} | 1 \rangle. \quad (31.27)$$

Itt $|1\rangle$ helyébe beírva 31.24-et az eredmény

$$\varepsilon_2 = \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{1}{E_n^0 - E_p^0} \langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_p^i \rangle = \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{|\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0} \quad (31.28)$$

azaz az energia másodrendig:

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \langle \varphi_n | (W) | \varphi_n \rangle + \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{|\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0} \quad (31.29)$$

A másodrendű korrekció előjele megegyezik $E_n^0 - E_p^0$ előjével, emiatt azt szokás mondani, hogy másodrendig a nívók annál jobban eltávolodnak egymástól, minél közelebb voltak eredetileg, és minél erősebb a $|\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle|$ "csatolás". Az állapot korrekcióját másodrendben úgy kapjuk, hogy most a többi $|\varphi_p^i\rangle$ -re vetítjük a 31.10 összefüggést. Ezt itt most explicite nem írjuk föl. Az eljárás folytatható magasabb rendekig, és egy fontos kérdés, hogy az így kapott sor mikor konvergens. Ennek vizsgálatához további matematikai ismeretekre lenne szükség. Ezt akérdést megkerülve közöljük, hogy a tapasztalat szerint sok esetben, pl. bizonyos atomfizikai problémáknál már az energia másodrendű és az állapot elsőrendű korrekciója a kísérletekkel igen jól egyező értékeket ad.

Az energia másodrendű korrekciójának abszolút értékét meg lehet becsülni a következő módon: Tekintsük a 31.28 sorban a nevezőket és legyen

$$\min_p |E_n^0 - E_p^0| = \Delta E \quad (31.30)$$

azaz a vizsgált E_n^0 energianívónak a legközelebbi energianívótól vett távolsága. Képezzük most a 31.28 sor abszolút értékét, ami biztosan kisebb vagy egyenlő a tagok abszolút értékének összegénél. Ezután a nevezőkben megjelenő $|E_n^0 - E_p^0|$ helyett írjuk mindenütt a nála kisebb ΔE -t. Mivel a számláló minden tagban pozitív a sor abszolút értékét így biztosan növeljük, azaz

$$\begin{aligned} |\varepsilon_2| &\leq \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{|\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle|^2}{|E_n^0 - E_p^0|} \leq \frac{1}{\Delta E} \sum_{p \neq n} \sum_i |\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle|^2 = \\ &= \frac{1}{\Delta E} \sum_{p \neq n} \sum_i \langle \varphi_n | \hat{W} \sum_{p \neq n} \sum_i |\varphi_p^i\rangle \langle \varphi_p^i| \hat{W} | \varphi_n \rangle \end{aligned} \quad (31.31)$$

A $\sum_{p \neq n} \sum_i |\varphi_p^i\rangle \langle \varphi_p^i|$ majdnem az egységoperátor, de hiányzik belőle a $|\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|$, tehát

$$|\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| + \sum_{p \neq n} \sum_i |\varphi_p^i\rangle \langle \varphi_p^i| = \mathbf{1} \quad (31.32)$$

Így

$$|\varepsilon_2| \leq \frac{1}{\Delta E} \langle \varphi_n | \hat{W} [\mathbf{1} - |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|] \hat{W} | \varphi_n \rangle = \frac{1}{\Delta E} [\langle \varphi_n | \hat{W}^2 | \varphi_n \rangle - \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_n \rangle^2] \quad (31.33)$$

Megszorozva mindkét oldalt λ^2 -el kapjuk, hogy a másodrendű energiakorrekció fölről a következőképpen becsülhető

$$|\lambda^2 \varepsilon_2| \leq \frac{1}{\Delta E} (\Delta W)_{\varphi_n}^2 \quad (31.34)$$

ahol $(\Delta W)_{\varphi_n}^2$ a perturbációs operátor szórásnégyzete a nemperturbált $|\varphi_n\rangle$ állapotban.

31.2. Degenerált energianívó perturbációja

Most föltesszük, hogy az E_n^0 energiaérték g_n -szer degenerált, ahol g_n egy egynél nagyobb de véges szám. Ez esetben az $\varepsilon_0 = E_n^0$ összefüggés nem elegendő a $|0\rangle$ meghatározására, mert a g_n számú $|\varphi_n^i\rangle$, $i = 1, 2, \dots, g_n$ bármely lineáris kombinációja eleget tesz a 31.8 sajátértékegyenletnek, és csak annyit tudunk, hogy $|0\rangle$ benne van az ezek által kifeszített altérben, tehát meg kell először határoznunk a "helyes" nulladik közelítést, amihez a lehetséges $|\psi(\lambda)\rangle$ -k tartanak, ha $\lambda \rightarrow 0$. Vetítsük most ehhez a 31.9 egyenletet valamely kiválasztott $|\varphi_n^i\rangle$ ortonormált bázisra az

E_n^0 -hoz tartozó sajátaltérben. Hasonló okok miatt mint a nemdegenerált esetben a nemeltűnő tagokból a g_n számú

$$\langle \varphi_n^i | \hat{W} | 0 \rangle = \varepsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle \quad (31.35)$$

egyenletet kapjuk. A $\langle \varphi_n^i | 0 \rangle$ a keresett $|0\rangle$ vektor kifejtése a választott $|\varphi_n^i\rangle$ bázisban az adott E_n^0 hoz tartozó altérben, amelynek mind a $|0\rangle$ mind a $|\varphi_n^i\rangle$ benne van. Ezért írhatjuk, hogy

$$|0\rangle = \sum_{i'=1}^{g_n} |\varphi_n^{i'}\rangle \langle \varphi_n^{i'} | 0 \rangle \quad (31.36)$$

ahol az összegzés csak az altérben belüli vektorokra történik. Beírva ezt a 31.35 egyenletbe, kapjuk, hogy

$$\sum_{i'=1}^{g_n} \langle \varphi_n^i | \hat{W} | \varphi_n^{i'} \rangle \langle \varphi_n^{i'} | 0 \rangle = \varepsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle \quad (31.37)$$

Ez valójában azt jelenti, hogy a \hat{W} operátort megszorítjuk kérdéses altérre, s az így kapott $\hat{W}^{(n)}$

$$\hat{W}^{(n)} | 0 \rangle = \varepsilon_1 | 0 \rangle \quad (31.38)$$

sajátértékegyenletét kapjuk a $|\varphi_n^i\rangle$ bázisban fölírva. A sajátértékek amelyek száma g_n adják az energijszűrésű korrekcióit, míg a sajátvektorok a fent említett értelemben a helyes nulladrendű közelítéseket a választott bázisvektorokban kifejtve. . Legyen ε_1^j ($j = 1, 2 \dots f_n^{(1)}$) az összes különböző sajátértéke a $\hat{W}^{(n)}$ -nek, ekkor a degenerált nívó $f_n^{(1)}$ számú

$$E_{n,j}(\lambda) = E_n^0 + \lambda \varepsilon_1^j \quad j = 1, 2 \dots f_n^{(1)} \leq g_n \quad (31.39)$$

különböző alnívóra hasd föl a perturbáció hatására. Előfordulhat, hogy az összes így kapott ε_1 különböző $f_n^{(1)} = g_n$, ekkor azt mondjuk, hogy a perturbáció a degenerációt teljesen feloldja. Ha nem ez a helyzet, akkor, a feloldás csak részleges, de az is előfordulhat, hogy a perturbáció figyelembevétel után is a teljesen megmarad a degeneráció ekkor $f_n^{(1)} = 1$. A magasabb rendű közelítések, amelyekkel itt már nem foglalkozunk, az első rendben megmaradt degenerációt általában tovább csökkentik illetve meg is szüntetik.

32. A H atom Stark effektusa és polarizálhatósága

A perturbációs számításra egy példaként tekintünk a H atom, pontosabban a Coulomb potenciálban mozgó töltés Stark effektusát, azaz megvizsgáljuk mi történik az energiaspektrummal, ha külső homogén sztatikus elektromos térbe helyezzük az atomot. A perturbáció operátora homogén elektromos térben: $W = -q\mathbf{E}\mathbf{R}$. Válasszuk \mathcal{E} irányát a z tengely irányának, ekkor $W = -q\mathcal{E}Z$. (elektronra q negatív) perturbációs paraméter itt természetes módon a külső tér erőssége az \mathcal{E} , ezt kívülről fizikailag is tudjuk változtatni. Ha ez nullához tart a perturbáció eltűnik. Mivel az alapállapot a H atomra nem degenerált, a gerjesztett állapotok viszont degeneráltak, ezért a két esetet külön tárgyaljuk.

32.1. Az alapállapot

A perturbáló operátor diagonális mátrixelemei

$$\Delta^1 = \langle n, \ell, m | W | n, \ell, m \rangle = -q\mathbf{E} \langle n, \ell, m | \mathbf{R} | n, \ell, m \rangle. \quad (32.1)$$

mindig eltűnnek paritás okok miatt, ezt láttuk a Zeeman effektus tárgyalásánál.

Most ennél egy kicsit többet mutatunk meg. A H_0 operátor sajátállapotai az L^2 operátornak is és így a Π paritás operátornak is $(-1)^\ell$ sajátértékkel. Ekkor, a $\Pi R = -R\Pi$ fölcserélési reláció miatt az általános mátrixelem

$$\langle n', \ell', m' | \Pi R | n, \ell, m \rangle = -\langle n, \ell, m | R \Pi | n, \ell, m \rangle \quad (32.2)$$

. A Π önadjungáltt, ezért a bal oldalon a Π -t a belső szorzat első tényezőjére is hatathatjuk. Így kapjuk, hogy

$$(-1)^{\ell'} \langle n', \ell', m' | \mathbf{R} | n, \ell, m \rangle = -(-1)^\ell \langle n, \ell, m | \mathbf{R} | n, \ell, m \rangle$$

Látható, hogy ha $\ell - \ell'$ páros akkor a két oldalon egymás ellentettje áll így

$$\text{ha } \ell - \ell' \text{ páros, akkor } \langle n', \ell', m' | \mathbf{R} | n, \ell, m \rangle = 0$$

(Meg lehet mutatni, hogy ennél több is igaz, R mátrixelemei mindig eltűnnek, kivéve, ha $\ell - \ell' = \pm 1$.) Ugyanezek a tulajdonságok érvényesek a P impulzus operátorra is, mert az ugyancsak páratlan vektoroperátor.

(Egy másik bizonyítás a következő: Ha koordinátareprezentációban írjuk föl a mátrixelemet, akkor az integrandus az $Y_{\ell',m'}^*$ és az \mathbf{R} -nek megfelelő \mathbf{r} valamelyik komponensének (x , y vagy z) szorzatát tartalmazza. Mivel az utóbbiak páratlan függvények, az $Y_{\ell,m}$ gömbfüggvények paritása pedig $(-1)^\ell$, ezért a szorzat paritása $(-1)^{\ell'+\ell+1}$. Ha itt ℓ és ℓ' paritása azonos, akkor $(-1)^{\ell'+\ell+1} = -1$, tehát az integrandus páratlan, s így az integrál eltűnik)

A perturbáló operátor várható értéke a fentiek szerint alapállapotra nézve tehát az $\ell = \ell' = 0$ esetben, amely nem degenerált, tehát eltűnik. Tehát az alapállapotban nincs elsőrendű korrekció. Az első nemeltűnő korrekció a másodrendű

$$\Delta^2 = q^2 \mathcal{E}^2 \sum_{n' \neq 1, \ell=1, m=0} \frac{|\langle \varphi_{n',\ell,m} | Z | \varphi_{100} \rangle|^2}{E_1^0 - E_{n'}^0} \quad (32.3)$$

ahol E_1^0 az alapállapot energiája, de az $n > 1$ -re való összegzés a folytonos spektrumra is vonatkozik. Valójában tehát a fenti korrekció egy végtelen összeg plusz egy $E > 0$ szerinti integrál, amelyben $\varphi_{n',\ell,m}$ szerepét a $\varphi_{E',\ell,m}$ folytonos spektrumba eső sajátvektorok veszik át. Az állapotok közül azonban összegezni illetve integrálni csak az $\ell = 1$, $m = 0$ kvantumszámúakra kell a fenti, illetve a Zeeman effektusnál látott kiválasztási szabálynak megfelelően. Mivel az E_1^0 a legkisebb az összes perturbálatlan sajátérték közül, a nevező minden n -re és a folytonos részre is negatív, így az egész kifejezés is negatív. Valóban, a kísérletek szerint is külső sztatikus térbe helyezve a H atomot az alapállapot energiája lejjebb tolódik, és ez az eltolódás a mező télerősségének négyzetével arányos, tehát az alapállapot Stark effektusa kvadratikusan és negatív. Megjegyezzük még, hogy a Coulomb probléma (hidrogén atom) esetében a fenti összeg egzaktul is kiszámítható, sőt a $H_0 - q\mathcal{E}\mathbf{R}$ sajátértékei pontosan is meghatározhatók, és az így kapott eredmény megegyezik a másodrendű perturbációs számítás eredményével. Más szóval a magasabb rendű tagokból származó korrekciók itt nullára összegződnek, vagyis ez esetben a perturbációs sor konvergens, ahogyan "illik".

A perturbációs számítás segítségével kiszámítható a β atomi polarizálhatóság, melyet a $\mathbf{p} = \beta \varepsilon_0 \mathbf{E}$, összefüggés definiál. β dimenziója térfogat. Továbbá a $\mathbf{P} = N \mathbf{p} = \chi \varepsilon_0 \mathbf{E}$, miatt a dielektromos szuszceptibilitás $\chi = N\beta$, ahol N az atomsűrűség, a térfogategységben lévő atomok száma.

Kvantummechanikailag az atomi dipólmomentumot a $q\mathbf{R}$ operátor várható értékével azonosítjuk (q negatív volta biztosítja, hogy a dipólmomentum vektor a pozitív magtól a negatív elektrontól a pozitív mag felé mutat) abban a $|\psi\rangle$ állapotban, amely a külső tér hatására kialakul, azaz a perturbált állapotban.

Tehát $\mathbf{p} = \langle \psi | q\mathbf{R} | \psi \rangle$ ahol első rendig

$$|\psi\rangle = |\varphi_{1,0,0}\rangle - \sum_{n' \neq 1} \frac{|\varphi_{n',\ell,m}\rangle \langle \varphi_{n',\ell,m} | qZ\mathcal{E} | \varphi_{100}\rangle}{E_1^0 - E_{n'}^0} \quad (32.4)$$

Ha itt $\langle \psi | q\mathbf{R} | \psi \rangle$ -ben csak az \mathcal{E} -ben legfölbjebb elsőrendű tagokat tartjuk meg, akkor

$$\langle \psi | q\mathbf{R} | \psi \rangle = \langle \varphi_{100} | q\mathbf{R} | \varphi_{100} \rangle - q^2 \mathcal{E} 2Re \sum_{n' \neq 1} \frac{\langle \varphi_{100} | \mathbf{R} | \varphi_{n',\ell,m} \rangle \langle \varphi_{n',\ell,m} | Z | \varphi_{100} \rangle}{E_1^0 - E_{n'}^0} \quad (32.5)$$

Megjegyezzük, hogy magasabb rendű tagok figyelembe vételével nemlineáris polarizálhatóságokat kapnánk, melyek nagyon erős terekben, főleg ha azok időben is változnak, lényeges szerepet játszanak, de ezzel itt most nem foglalkozunk. A fenti összegben az első tag mint láttuk eltűnik, továbbá a

$\langle \varphi_{100} | q\mathbf{R} | \varphi_{n',\ell,m} \rangle \langle \varphi_{n',\ell,m} | Z | \varphi_{100} \rangle$ alakú szorzatokban csak az $R = Z$ marad a kiválasztási szabályok miatt, a második tényező u.i. csak az $m = 0$ esetben nem tűnik el, míg az első az $\mathbf{R} = X$ és Y esetben csak az $m = 1$ esetben. Tehát az elsőben is csak z t vehetünk, azaz $\hat{\mathbf{z}}$ irányú elektromos tér $\hat{\mathbf{z}}$ irányú dipólmomentumot indukál, azaz az atom dielektromosan izotróp, ami nem mindig van így pl. egy molekulánál. A polarizálhatóság tehát itt skalár és nem tenzor, ahogyan azt várjuk is, és értéke a

$$p = -q^2 \mathcal{E} 2 \sum_{n' \neq 1} \frac{|\langle \varphi_{100} | Z | \varphi_{n',\ell,m} \rangle|^2}{E_1^0 - E_{n'}^0} = q^2 \mathcal{E} 2 \sum_{n' \neq 1} \frac{|\langle \varphi_{100} | Z | \varphi_{n',\ell,m} \rangle|^2}{E_{n'}^0 - E_1^0} \quad (32.6)$$

összefüggésből olvasható le. A korábban tárgyalt a másodrendű korrekcióra vonatkozó becslés segítségével a polarizálhatóságra felső korlátot adhatunk. Az $E_n^0 = \frac{e_0^2}{2a_0}$ $E_1^0 = -\frac{e_0^2}{2a_0} \frac{1}{n^2}$ alapján a nevező minden tagban nagyobb mint $\frac{3}{4} \frac{e_0^2}{2a_0}$. Ezért minden tagba ezt írva és a $q^2 = e_0^2 4\pi\epsilon_0$ összefüggéssel

$$\begin{aligned} p &\leq q^2 \mathcal{E} 2 \frac{4}{3} \frac{2a_0}{e_0^2} \sum_{n' \neq 1} |\langle \varphi_{100} | Z | \varphi_{n',\ell,m} \rangle|^2 = \\ &= 4\pi\epsilon_0 a_0^3 \frac{16}{3} \mathcal{E} \langle \varphi_{100} | Z (1 - |\varphi_{100}\rangle \langle \varphi_{100}| Z | \varphi_{100}\rangle) = \\ &= 4\pi\epsilon_0 a_0^3 \frac{16}{3} \mathcal{E} \langle \varphi_{100} | Z^2 | \varphi_{100}\rangle \end{aligned} \quad (32.7)$$

A könnyen kiszámítható $|\langle \varphi_{100} | Z^2 | \varphi_{0',0,0} \rangle| = a_0^2$ összefüggéssel azt kapjuk, hogy

hogy

$$\beta \leq 4\pi\epsilon_0 a_0^3 \frac{16}{3} = 5.3 \times 4\pi\epsilon_0 a_0^3. \quad (32.8)$$

Mint fentebb már említettük a fenti 32.6 sor, amely azonos (32.3)-vel egzaktul is kiszámítható és az eredmény a kísérletekkel egyezően

$$\beta = 4.5 \times 4\pi\epsilon_0 a_0^3. \quad (32.9)$$

32.2. Az első gerjesztett állapot Stark effektusa

$$W = -q\mathcal{E}Z$$

Ennek mátrixelemei $\ell = \ell'$ re eltűnnek, tehát csak az s és p állapotok között lesz mátrixelem, de azt is tudjuk, hogy $m = m'$ nek is teljesülnie kell, Így csak az $\ell = 0, m = 0, 2s$ és az $\ell = 1, m = 0, 2p$ állapotok között lesz nem eltűnő a mátrixelem. Ezt kiszámítva az eredmény a $\langle \varphi_{200} | Z | \varphi_{2,1,0} \rangle = 3a_0$. A mátrix tehát lényegében 2×2 -es:

$$\begin{pmatrix} & -3q\mathcal{E}a_0 \\ -3q\mathcal{E}a_0 & \end{pmatrix} \quad (32.10)$$

melynek sajátértékei $\mp 3q\mathcal{E}a_0$, a megfelelő sajátvektorok:

$$|\mp\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_{2,1,0}\rangle \pm |\varphi_{200}\rangle) \quad (32.11)$$

az eredmény egy lineáris Stark effektus, amely a (spin nélkül) négyszeres degenerációt részben felhasítja.

33. A He atom energiaszintjei

A H atom után a periódusos rendszerben a hélium (He) következik, amelynek két elektronja van, ezért a tárgyalása jóval bonyolultabb mint a hidrogéné. Az alábbiakban He-al együtt tárgyaljuk a He-szerű ionokat is, azaz minden olyan ion, amelynek a magtöltése $Z \geq 2$, és 2 elektronja van. A nemrelativisztikus közelítésre, azaz egy egyszerű perturbált Coulomb problémára szorítkozunk.

A Hamiltoni:

$$H = H_1 + H_2 + \frac{e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} \quad (33.1)$$

ahol

$$H_i = \frac{P_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{R}_i|} \quad i = 1, 2 \quad (33.2)$$

egy-egy Z magtöltésű H atom Hamilton operátora. $H_1 + H_2$ két független elektront jelent, az $\frac{e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|}$ a két elektron kölcsönhatási energiájának felel meg. Tekintsük ez utóbbit perturbációnak, és adjuk meg először a nem perturbált probléma sajátértékeit.

33.1. A sajátértékprobléma nulladik közelítésben

A H_i -kre vonatkozó megfelelő megoldás, a Coulomb probléma megoldása tehát ismert:

$$H_i |\psi_{n_i \ell_i m_i}\rangle = \varepsilon_{n_i} |\psi_{n_i \ell_i m_i}\rangle \quad (33.3)$$

ahol az energiasajátértékek (Rydbergben mérve)

$$\varepsilon_{n_i} = -\frac{Z^2}{n_i^2} \quad (33.4)$$

és a stacionárius állapotokat az $0 \leq \ell_i < n$ mellékvantumszámmal és az $|m_i| \leq \ell_i$ mágneses kvantumszámmal jellemeztük. Mint ismert az n_i főkvantumszámmal jellemzett energia a spin figyelembevétel nélkül n^2 -szeresen degenerált.

A nem perturbált $H_1 + H_2$ operátor sajátértékproblémájának nyilvánvalóan megoldásai lesznek az ilyen állapotok tenzorszorzatai, azaz a $|\psi_{n_i \ell_i m_i}\rangle = |n_i \ell_i m_i\rangle$ jelöléssel, amely csak a pályarészét jelenti a megoldásnak, azaz a spint nem tartalmazza

$$(H_1 + H_2) |n_1 \ell_1 m_1\rangle |n_2 \ell_2 m_2\rangle = \varepsilon_{n_1 n_2} |n_1 \ell_1 m_1\rangle |n_2 \ell_2 m_2\rangle \quad (33.5)$$

ahol

$$\varepsilon_{n_1 n_2} = \left(-\frac{Z^2}{n_1^2} - \frac{Z^2}{n_2^2} \right) \quad (33.6)$$

Az $|n_1 \ell_1 m_1\rangle |n_2 \ell_2 m_2\rangle$ alakú szorzatállapotok azonban nem tesznek eleget a szimmetrizálási posztulátumnak, mely szerint több azonos, feles spinű részecske (fermion) esetén a megengedett állapotoknak a részecskék fölcserélésénél antiszimmetrikusnak kell lennie. Ezt a problémát azonban nem egyedül a főnti szorzatállapotok antiszimmetrizálásával oldjuk meg, hanem figyelembe kell venni a kételektron rendszer spinállapotait is. AH operátor ebben a nemrelativisztikus közelítésben nem tartalmazza az elektronok spinoperátoraitól, tehát azzal fölcserélhető. Ezért bármilyen együttes kételektron spinállapottal egyszerűen megszorozva a térbeli mozgáshoz tartozó sajátállapotokat az továbbra is sajátállapota marad a H -nak.

Az antiszimmetrizálás szempontjából a lényeges, hogy a két elektron azon

együttes spinállapotai amelyek az $S^2 = (S_1 + S_2)^2$ -nek $s(s+1)$ illetve az $S_z = S_{1z} + S_{2z}$ -nek is sajátállapotai – $\hbar^2 s(s+1)$ illetve $\hbar m_s$ sajátértékkel – a következők:

$$|\chi_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_1 |-\rangle_2 - |-\rangle_1 |+\rangle_2) \quad s = 0, m_s = 0 \quad (33.7)$$

szingulett állapot, amely antiszimmetrikus, és a

$$|\chi_{s,1}\rangle = |+\rangle_1 |+\rangle_2 \quad s = 1, m_s = 1 \quad (33.8)$$

$$|\chi_{s,0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_1 |+\rangle_2 + |-\rangle_1 |-\rangle_2) \quad s = 1, m_s = 0 \quad (33.9)$$

$$|\chi_{s,-1}\rangle = |-\rangle_1 |-\rangle_2 \quad s = 1, m_s = -1 \quad (33.10)$$

triplett állapot amelyek szimmetrikusak a részecskék fölcserélésére nézve. A teljes állapotot tehát két módon tehetjük antiszimmetrikussá, szimmetrikus pályarészt antiszimmetrikus spinállapottal, vagy antiszimmetrikus pályarészt szimmetrikus spinállapottal szorzunk:

$$|^1\Psi\rangle = |\psi_s\rangle |\chi_a\rangle \quad |^3\Psi\rangle = |\psi_a\rangle |\chi_s\rangle \quad (33.11)$$

ahol $|\psi_s\rangle$ és $|\psi_a\rangle$ az $|n_1 \ell_1 m_1\rangle |n_2 \ell_2 m_2\rangle$ szorzat szimmetrizálásából illetve antiszimmetrizálásából származó pályarész, a teljes állapotot pedig $|^1\Psi\rangle$ vel illetve $|^3\Psi\rangle$ -vel jelöltük. A jelölés oka az, hogy a spektroszkópiában $2s + 1$ értékét a spinállapot multiplicitását (amely a He esetén szingulett vagy triplett) így szokás feltüntetni az állapot jelénél.

Vizsgáljuk meg részletesebben először a legkisebb energiájú állapotot azaz az alapállapotot. Az 33.6 által megadott energia akkor a legkisebb, ha $n_1 = n_2 = 1$, és értéke így:

$$\varepsilon_{1,1} = -2Z^2(Ry) \quad (33.12)$$

azaz a He atomra $-8 Ry$. Az $n_1 = n_2 = 1$ állapot a pályarésze nem lehet elfajult, tehát ehhez a sajátértékhez csak az

$$|n_1 = 1, \ell_1 = 0, m_1 = 0\rangle |n_2 = 1, \ell_2 = 0, m_2 = 0\rangle \equiv |1, 0, 0\rangle |1, 0, 0\rangle \quad (33.13)$$

pályarész tartozhat, amely szimmetrikus, és nem is antiszimmetrizálható. Így a teljes alapállapot 0-ik közelítésben

$$|^1S_0\rangle = |1, 0, 0\rangle |1, 0, 0\rangle |\chi_a\rangle \quad (33.14)$$

amelynek pályarésze szimmetrikus, spinrésze pedig antiszimmetrikus szingulett állapot. Az 1^1S_0 jelölést alább magyarázunk meg.

Vizsgáljuk most a gerjesztett állapotokat. Ezeknél valamelyik n már nagyobb mint 1. Látható, azonban hogy energia szerint növekvő sorrendben azok az állapotok következnek, amelyeknél az egyik főkvantumszám egyenként nő, míg a másik 1 marad:

$$\varepsilon_{n,1} = -Z^2\left(\frac{1}{n^2} + 1\right) \quad (33.15)$$

mert ez még $n = \infty$ esetén is

$$\varepsilon_{\infty,1} = -Z^2 \quad (33.16)$$

kisebb mint az $n_1 = n_2 = 2$ -höz tartozó $\varepsilon_{2,2} = -Z^2/2$ energia. Az $n_1 = \infty, n_2 = 1$ azt jelenti, hogy az egyik elektron energiája 0-vá vált, azaz a végtelenbe távozott, másképpen szólva $Z = 2$ estén a He ionizálódott, illetve $Z > 2$ esetén a megfelelő ion egy további elektront elveszített. Az energiát He esetén emiatt szokás inkább a $-Z^2 = -4Ry$ értéktől mérni, azaz az alapállapot energiáját, amely az eredeti skálán $-8Ry$ ezen az eltoltskálán csak $-4 Ry$, ez tkp. az egyszeres ionizációs energia a nulladik közelítésben. Az $n_1 = n_2 = 2$ stb állapotok így az egyszeresen ionizált He atom nem kötött és emiatt a folytonos spektrumba eső energiájával megegyező energiájúak ezért kísérleti kimutatásuk nehéz, mert a megfelelő energia közlése nyomán az egyik elektron visszaesik az $n = 1$ állapotba a másik pedig fölveszi a maradék energiát és az atom ionizálódik, ezt nevezik autoionizációnak. A valódi kötött állapotok tehát azok, ahol valamelyik $n = 1$, és a másik $< \infty$. A megfelelő antiszimmetrikus állapotok a következők:

$$|{}^1\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0, 0\rangle_1 |n, \ell, m\rangle_2 + |1, 0, 0\rangle_2 |n, \ell, m\rangle_1) |\chi_a\rangle \quad (33.17)$$

$$|{}^3\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0, 0\rangle_1 |n, \ell, m\rangle_2 - |1, 0, 0\rangle_2 |n, \ell, m\rangle_1) |\chi_s\rangle \quad (33.18)$$

ahol az alapállapot ismét láthatólag csak a szingulett lehet. Ezen állapotok jelölése a következő konvenció alapján történik: $n^{2s+1}L_j$, ahol n a főkvantumszám, L helyére az $S, P, D, F \dots$ betűk valamelyikét tesszük, az $\ell = 0, 1, 2, 3 \dots$ értékétől függően, j a teljes impulzusmomentum lehetséges értéke, amelyről tudjuk, hogy $\ell + s$ és $|\ell - s|$ közé eső egész szám, (mert jelen esetben s egész). Szingulett ($s = 0$) esetén nyilvánvalóan $j = \ell$. Triplettnél ($s = 1$) pedig $\ell = 0$ -ra, azaz S állapotra j csak $j = s = 1$ lehet, míg $\ell > 0$ esetén három lehetséges

értéket vehet föl: $j = \ell + 1, \ell, \ell - 1$. A lehetséges stacionárius állapotok tehát:

$$\begin{array}{cc}
 \text{szingulett} & \text{triplett} \\
 1^1 S_0, & - \\
 2^1 S_0, 2^1 P_1 & 2^3 S_1, 2^3 P_{2,1,0} \\
 3^1 S_0, 3^1 P_1, 3^1 D_2 & 3^3 S_1, 3^3 P_{2,1,0}, 3^3 D_{3,2,1}, \\
 \vdots & \vdots
 \end{array} \quad (33.19)$$

Az egy sorban lévő állapotok energiája ebben a nulladik közelítésben azonos. $1^3 S_0$ állapot az antiszimetria előírása ld. (33.18) miatt nincs, mert a megfelelő pályarész ekkor eltűnik.

33.2. Az energiakorrekciók első rendben

Vegyük most már figyelembe az $\frac{e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|}$ elektron-elektron kölcsönhatásból származó perturbációt, és számítsuk ki a korrekciókat első rendben. Először is megjegyezzük, hogy a fenti teljes H a kölcsönhatás miatt már nem cserélhető föl külön az \mathbf{L}_1 és \mathbf{L}_2 pályaimpulzuszmomentum operátorok komponenseivel, az összegükkel továbbra is fölcserélhető marad, ezért az $\mathbf{L}^2 = (\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2)^2$ sajátértékei továbbra is jó kvantumszámok, és ugyanez igaz \mathbf{S} -re illetve $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ -re is. Mivel a perturbáció nem függ a spintől, a korrekciók számításánál a spinrészekből $\langle \chi_a | \chi_a \rangle = 1$ stb. adódik, így amint azt látni fogjuk a spinrész az eredményt csak közvetve, a pályarész szimmetriáján keresztül befolyásolják.

33.2.1. Alapállapot

Az alapállapot esetén a korrekció:

$$\Delta^1 \varepsilon_{11} = \langle 1, 0, 0 |_1 \langle 1, 0, 0 |_2 \frac{e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} |1, 0, 0 \rangle_1 |1, 0, 0 \rangle_2 \quad (33.20)$$

Ennek értékét koordináta reprezentáció segítségével konkrétan is ki lehet számítani.

$$\Delta^1 \varepsilon_{11} = \int \frac{\psi_{100}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{100}^*(\mathbf{r}_2) \psi_{100}(\mathbf{r}_1) \psi_{100}(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3 r_1 d^3 r_2 = \quad (33.21)$$

$$\int \frac{|\psi_{100}(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_{100}(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 \quad (33.22)$$

Emlékeztetünk arra, hogy a Coulomb probléma (H atom) normált alapállapotú hullámfüggvénye:

$$\langle \mathbf{r} | 1, 0, 0 \rangle = \psi_{100}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \exp(-Zr/a_0) \quad (33.23)$$

ahol a_0 a Bohr sugár. Így

$$\Delta^1 \varepsilon_{11} = \left[\frac{1}{\pi} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 \right]^2 e^2 \int d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{\exp(-2Zr_1/a_0 - 2Zr_2/a_0)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (33.24)$$

Az integrál gömbi polárkoordinátákra való áttéréssel kiszámítható

$$\frac{1}{\pi^2} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^6 e^2 \int r_1^2 dr_1 \int r_2^2 dr_2 \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \exp\{-2Z(r_1 + r_2)/a_0\} \quad (33.25)$$

stb. a technikai részleteket elhagyva az eredmény:

$$\Delta^1 \varepsilon_{11} = \frac{5}{4} Z \frac{e^2}{2a_0} = \frac{5}{4} Z R_y \quad (33.26)$$

ez He-ra $\frac{5}{2} R_y$. A korrekció pozitív mert az elektronok taszítják egymást. Tehát a perturbációs számítás első rendjében az alapállapotú energia kétszeres ionizációs energia He-ra:

$$\varepsilon_{11} = (-8 + \frac{5}{2}) R_y = \frac{11}{2} R_y = -74,8 eV \quad (33.27)$$

A kísérleti érték, amely a kétszeres ionizációhoz szükséges energia: $-78,8 eV$. Alább látni fogunk egy módszert (variációs számítás), amellyel ennél jóval pontosabb érték kapható.

33.2.2. Gerjesztett állapotok, kicserélődési kölcsönhatás

Hasonó módon koordinátareprezentációban, a gerjesztett állapotok korrekciói

$$\Delta \varepsilon_{n1}^{1,3} = \frac{e^2}{2} \int \frac{|\psi_{100}(\mathbf{r}_1) \psi_{nlm}(\mathbf{r}_2) \pm \psi_{100}(\mathbf{r}_2) \psi_{nlm}(\mathbf{r}_1)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3 r_1 d^3 r_2 = \quad (33.28a)$$

$$= \frac{e^2}{2} 2 \int \frac{|\psi_{100}(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_{nlm}(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3 r_1 d^3 r_2 \pm \quad (33.28b)$$

$$\pm e^2 2 \operatorname{Re} \int \frac{\psi_{100}(\mathbf{r}_1) \psi_{nlm}(\mathbf{r}_2) \psi_{100}^*(\mathbf{r}_2) \psi_{nlm}^*(\mathbf{r}_1)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (33.28c)$$

ahol a felső + előjel a szingulett, az alsó – a triplett állapotra vonatkozik. Elegendő az $m = 0$ -ra számolni. Az integrálok kiszámíthatók zárt alakban is, de számunkra az a lényeges, hogy

$$\Delta\varepsilon_{n1}^{1,3} = K_{n,\ell} \pm J_{n\ell} \quad (33.29)$$

ahol $K_{n,\ell}$ a 33.28b első tagja, és ezt Coulomb integrálnak nevezzük, a $J_{n\ell}$ második tagot pedig kicserélődési integrálnak. Mindkét integrál értéke pozitív. Az elnevezés oka: A $K_{n,\ell}$ pontosan két $e|\psi|^2$ alakú töltéssűrűség között föllépő Coulomb tasztítás energiája, míg a $J_{n\ell}$ második tag az antiszimmetrizálás következménye, tehát tipikusan kvantumos effektus, ennek nincs klasszikus elektrosztatikai megfelelője. Noha a Hamilton operátor nem függ a spintől, a teljes állapot antiszimmetriájának követelménye miatt az energia függ attól, hogy a spinállapotok szimmetrikusak vagy antiszimmetrikusak, és a gerjesztett triplett állapot energiája ebben az elsőrendű közelítésben $2J_{n\ell}$ -el alacsonyabban van mint a megfelelő szinguletté, azaz a 33.19 táblázatban a jobboldali állapotok energiája kisebb, a perturbáció felhasítja a szingulett-triplett degenerációt.

Ezt az eredményt másképp is meg szokták fogalmazni. Használjuk az $\mathbf{S}^2 = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2$ -ből következő $2\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2 = \mathbf{S}^2 - \mathbf{S}_1^2 - \mathbf{S}_2^2$ összefüggést, a spin operátorokra. ennek alapján a $2\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2$ operátor hatása egy $|\chi\rangle$ állapotra, mely mindhárom jobboldali tagnak sajátállapota

$$2\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2 |\chi_{a,s}\rangle = \left(\hbar^2 s(s+1) - 2 \times \frac{3}{4} \hbar^2 \right) |\chi_{a,s}\rangle \quad (33.30)$$

amelynél $s(s+1)$ értéke $|\chi_a\rangle$ -ra 0 $|\chi_s\rangle$ -re 2, azaz $\frac{2\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2}{\hbar^2}$ hatása $|\chi_a\rangle$ -ra $-\frac{3}{2}|\chi_a\rangle$, a $|\chi_s\rangle$ -re viszont $+\frac{1}{2}|\chi_s\rangle$ Emiatt az elsőrendű korrekciót úgy írhatjuk mint egy effektív spintől függő kölcsönhatási operátort, amelynek alakja

$$W = K_{n\ell} - \frac{J_{n\ell}}{2} - \frac{2J_{n\ell}}{\hbar^2} \mathbf{S}_1\mathbf{S}_2 \quad (33.31)$$

melynek mátrixelemei éppen a kívánt 33.29 eredményt adják az spinállapot multiplicitásától függően. Ezt szokás kicserélődési kölcsönhatásnak nevezni. Megjegyezzük, hogy szilárd anyagokban hasonló okok miatt lép föl pl. szomszédos atomok spinfüggő kölcsönhatása, amely tehát nem közvetlenül a spinekhez kapcsolódó mágneses momentumok közti energia, amely a $J_{n\ell}$ -nél sok nagyságrenddel kisebb, hanem közvetve a pályaállapot szimmetriáján keresztül érvényesülő kölcsönhatás. Ez okozza a ferromágneses vagy antiferromágneses viselkedést. ld.

Stat. fiz.

A szingulett (parahélium) és tripllett állapotú (ortohélium) He energianívói tehát némileg eltérnek egymástól, és a kettő között csak olyan elektrodinamikai kölcsönhatás létesíthetne átmenetet, amely spinfüggő. Az ilyen kölcsönhatás rendkívül gyöngé, ezért a szingulett és tripllett állapotok között gyakorlatilag nem lehet átmenetet megfigyelni. Emiatt a kvantummechanika előtt azt gondolták hogy kétfajta He van, a szingulett állapotút parahéliumnak, a tripllettet ortohéliumnak nevezték. Alapállapotban az előzőek szerint tehát csak parahélium lehet.

Az ortohélium, amelynek állapotai az alapállapotból gerjesztett parahéliumból ütközések legalacsonyabb állapota emiatt rendkívül stabil élettartama több nap(?).

34. A Ritz féle variációs módszer és alkalmazása a He atom alapállapotára

34.1. A Ritz féle módszer

Tekintsünk egy tetszőleges kvantumrendszert adott H operátorral. Megmutatjuk, hogy a $\langle \psi | H | \psi \rangle$ várható érték *tetszőleges ψ esetén mindig nagyobb mint a H operátor legkisebb sajátértéke, E_0* . Valóban ha $|\psi\rangle$ -t kifejtjük a H teljes rendszert alkotó $|\varphi_k\rangle$ sajátállapotai szerint, akkor az alábbi egyenőtlenséget vezethetjük le :

$$\begin{aligned} \langle \psi | H | \psi \rangle &= \sum_k \langle \psi | H | \varphi_k \rangle \langle \varphi_k | \psi \rangle = \sum_k E_k \langle \psi | \varphi_k \rangle \langle \varphi_k | \psi \rangle = \\ &= \sum_k E_k |\langle \psi | \varphi_k \rangle|^2 \geq E_0 \sum_k |\langle \psi | \varphi_k \rangle|^2 = E_0, \end{aligned} \quad (34.1)$$

ahol E_0 a H legkisebb sajátértéke. Ebből következik, hogy ha fölveszünk egy tetszőleges ψ állapotot, amely valamilyen megfelelően választott β_i paramétersereg függvénye, és keressük az $F(\beta) = \langle \psi(\beta) | H | \psi(\beta) \rangle$ többváltozós függvény minimumát, ez a minimum az alapállapoti energia egy felső korlátja lesz. Általában annál jobb eredmény érhető el, minél több β_i paramétertől függő próbaállapottal végezzük a számítást. Ha a próbafüggvény bizonyos β_i^0 helyen éppen a valódi alapállapot, akkor ilyen módon a valódi alapállapoti energiát is megkaphatjuk. Arra vonatkozóan, hogy hogyan érdemes a próbafüggvényt fölvenni, a fizikai probléma természete nyújthat intuíciót. Annak ellenére, hogy elég nagyszámú paramétertől függő próbafüggvénnyel az alapállapoti energia rendszerint nagyon nagy pontosság-

gal megközelíthető, nem szabad azt gondolni, hogy a minimális energiát nyújtó próbaállapot és a valódi alapállapot az állapotok terében is közel lenne egymáshoz.

34.2. A He atom alapállapot energiája

Példaként tekintünk a He atom alapállapot energiájának meghatározását variációs módszerrel. Legyen a próbafüggvény alakja, két hidrogénszerű 1s függvény szorzata, melyek olyanok mint a H alapállapota, de $Z = 1$ illetve 2 helyett egy effektív Z^* magtöltéssel :

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; Z^*) = \tilde{\varphi}_{1,0,0}(\mathbf{r}_1)\tilde{\varphi}_{1,0,0}(\mathbf{r}_2) = \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z^*}{a_0} \right)^{3/2} \right]^2 e^{-Z^*(r_1+r_2)/a_0}, \quad (34.2)$$

és legyen a variációs paraméter Z^* .

$$H = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{R_1} - \frac{Ze^2}{R_2} + \frac{e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} - \frac{Z^*e^2}{R_1} - \frac{Z^*e^2}{R_2} - (Z - Z^*)e^2 \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) + \frac{e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} \quad (34.3)$$

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = 2\varepsilon_1(Z^*) - 2(Z - Z^*) \left\langle \tilde{\varphi} \left| \frac{e^2}{R_1} \right| \tilde{\varphi} \right\rangle + \left\langle \psi \left| \frac{e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} \right| \psi \right\rangle \quad (34.4)$$

ahol $\varepsilon_1(Z^*)$ a Z^* magtöltésű H atom alapállapot energiája $\varepsilon_1(Z^*) = -1(Z^*)^2 Ry$. A második tag:

$$-2(Z - Z^*) \left\langle \tilde{\varphi} \left| \frac{e^2}{R_1} \right| \tilde{\varphi} \right\rangle = 2 \frac{(Z - Z^*)}{Z^*} \left\langle \tilde{\varphi} \left| -\frac{e^2 Z^*}{R_1} \right| \tilde{\varphi} \right\rangle \quad (34.5)$$

Ez a tag egy Z^* magtöltésű hidrogénszerű ion elektronja potenciális energiájának várható értéke. Ezt egzaktul ki lehet számítani, akár a megfelelő integrállal, akár a következő viriáltételnek nevezett összefüggés segítségével,

$$\langle E_{kin} \rangle = -\frac{1}{2} \langle V \rangle, \quad (34.6)$$

amely a Coulomb potenciál esetén mint kölcsönhatás által összetartott rendszerre érvényes. (Általában, ha a potenciál a koordináták homogén k -ad fokú függvénye, akkor az $\langle E_{kin} \rangle = \frac{k}{2} \langle V \rangle$ összefüggés áll fenn. Pl. oszcillátornál $k = 2$, a Coulomb térnél, $k = -1$)

Mivel az adott $\tilde{\varphi}$ állapotban az $-\frac{e^2 Z^*}{R_1}$ potenciál esetén,

$$\langle E_{kin} + V(Z^*) \rangle = \varepsilon_1(Z^*), \quad (34.7)$$

a két egyenlet különbségéből

$$\langle V \rangle = 2\varepsilon_1(Z^*) \quad (34.8)$$

tehát 34.4 második tagja:

$$2 \frac{(Z - Z^*)}{Z^*} 2\varepsilon_1(Z^*) = -4 \frac{(Z - Z^*)}{Z^*} (Z^*)^2 = -4(Z - Z^*)Z^* \quad (34.9)$$

A harmadik tag a perturbáló potenciál várható értéke a He atom alapállapotban, amelyet már előzőleg a Z -re kiszámítottunk. Az eredmény

$$\left\langle \psi \left| \frac{e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} \right| \psi \right\rangle = \frac{5}{4} Z^* \quad (34.10)$$

Így összeadva mindhárom tagot:

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = -2(Z^*)^2 - 4(Z - Z^*)Z^* + \frac{5}{4}Z^* = 2Z^{*2} - 4ZZ^* + \frac{5}{4}Z^* \quad (34.11)$$

és ennek a kifejezésnek a minimumát keressük a Z^* mint variációs paraméter szerint. A derivált $4Z^{*2} - 4Z + \frac{5}{4}$ amely 0 a $Z^* = Z - \frac{5}{16}$ -od helyen. Azaz az effektív magtöltés kisebb mint a valódi, ahogyan azt a leárnnyékolás miatt várjuk is. $Z = 2$, azaz a hélium esetén $Z^* = 27/16$. Ezt visszaírva $\langle \psi | H | \psi \rangle$ -be kapjuk, hogy $\langle \psi | H | \psi \rangle_{\min} = -5.7 Ry = -77.4 eV$, ami már jóval közelebb van a kísérleti $-78.8 eV$ értékhez, mint a perturbációszámítással kapható $-74,9 eV$.

A variációszámításról továbbiak.

35. Időfejlődés és evolúciós operátor, Schrödinger kép, Heisenberg kép

Posztuláltuk, hogy a kvantumrendszer időfejlődését a Schrödinger egyenlet írja le:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \quad (35.1)$$

Az egyenlet fontos tulajdonságai, hogy lineáris és megőrzi a normát, amennyiben a H önadjungált. Mivel időben elsőrendű, a kezdeti érték megadása megmondja

mi lesz az állapot később.

Most megfordítjuk a dolgot és bemutatunk egy gondolatmentet, amelyből a Schrödinger egyenlet következik, s így megalapozza azt, hogy posztulátumként valóban a Schrödinger egyenletet írjuk elő. érvelést, amellyel kvázi levezetjük a Schrödinger egyenletet bizonyos egyszerű föltételezésekkel. Vezessünk be egy *lineáris* operátort, amely a kezdeti értékhez hozzárendeli a t -beli értéket:

$$U(t, t_0)\Psi(t_0) = \Psi(t) \quad (35.2)$$

$U(t, t_0)$ neve evolúciós operátor, és nyilvánvalóan $U(t_0, t_0) = 1$. Ha azt is előírjuk, hogy U őrizze a normát, akkor abból következik, hogy $U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = 1$ azaz U izometrikus. Írjuk elő továbbá, hogy létezzék $U(t, t_0)$ inverze. Ez esetben $U^{-1}(t, t_0)\Psi(t) = \Psi(t_0)$ és így $U^{-1}(t, t_0) = U(t_0, t) = U^\dagger(t, t_0)$. Világos továbbá a következő tulajdonság

$$U(t, t_1)U(t_1, t_0) = U(t, t_0) \quad (35.3)$$

Legyen most

$$U(t + dt, t)\Psi(t) = \Psi(t + dt) \quad (35.4)$$

Azt állítjuk, hogy minden fönti tulajdonság teljesül, ha

$$U(t + dt, t) = 1 - i\Omega(t)dt \quad (35.5)$$

első rendben, ahol Ω önadjungált operátor.

A kompozíciós tulajdonság infinitezimális dt -kre

$$\begin{aligned} U(t_0 + dt_1 + dt_2, t_0 + dt_1)U(t_0 + dt_1, t_0) &= (1 - i\Omega(t_0)dt_2)(1 - i\Omega(t_0)dt_1) = \\ &= 1 - i\Omega(t_0)dt_2 - i\Omega(t_0)dt_1 + O(dt^2) = \\ &U(t_0 + dt_1 + dt_2, t_0) \end{aligned} \quad (35.6)$$

Unitaritás is.

$$\begin{aligned} U(t + dt, t_0) &= U(t + dt, t)U(t, t_0) = (1 - i\Omega(t)dt)U(t, t_0) \\ U(t + dt, t_0) - U(t, t_0) &= (-i\Omega(t)dt)U(t, t_0) \end{aligned} \quad (35.7)$$

$$i\frac{\partial}{\partial t}U(t, t_0) = \Omega(t)U(t, t_0) \quad H = \frac{\Omega(t)}{\hbar} \quad (35.8)$$

Ebből

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0) \quad (35.9)$$

illetve

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) \Psi(t_0) = H(t)U(t, t_0) \Psi(t_0) \quad (35.10)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \quad (35.11)$$

Az U -ra vonatkozó egyenlet megoldása:

(i) H független az időtől

$$U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \quad (35.12)$$

(ii) H függ az időtől, de a különböző időpontokban vett értékei fölcserélhetőek

$$U(t, t_0) = e^{-i \int_{t_0}^t H(t_1)/\hbar dt_1} \quad (35.13)$$

(iii) H függ az időtől, de a különböző időpontokban vett értékei nem fölcserélhetőek. Ebben a legáltalánosabb esetben $U(t, t_0) - t$ a következő integrálegyenlet határozza meg:

$$U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t_1)U(t_1, t_0) dt_1 \quad (35.14)$$

megoldás szukceszív approximációval:

$$U^{(0)}(t, t_0) = 1$$

$$U^{(1)}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t_1) dt_1 \quad (35.15)$$

$$U^{(2)}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t_1)U(t_1, t_0) dt_1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t H(t_1) \int_{t_0}^{t_1} H(t_2) dt_2 dt_1:$$

⋮

$$U(t, t_0) = \mathcal{T} e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \quad (35.16)$$

Az utóbbi kompakt írásmódban \mathcal{T} az úgynevezett időrendező operátor.

35.1. Schrödinger és Heisenberg kép

$$U_S(t, t_0)\Psi(t_0) = \Psi_S(t) \quad (35.17)$$

Vezessük be a

$$U_S^+(t, t_0)\Psi_S(t) = \Psi_S(t_0) = \Psi_H(t_0) \quad (35.18)$$

definícióval a $\Psi_H(t_0)$ állapotvektort un. Heisenberg képben, amely definíció szerint nem függ időtől. Az időfüggést az operátorok veszik át. Az operátorok alakja Heisenberg képben a következő egyenletekből deríthető ki.

$$\begin{aligned} A_S\Psi_S &= \Phi_S \\ A_S\Psi_S &= A_S U(t, t_0)\Psi_H(t_0) = \Phi_S \\ U^+(t, t_0)A_S\Psi_S &= U^+(t, t_0)A_S U(t, t_0)\Psi_H(t_0) = \Phi_H \\ A_H &= U^+(t, t_0)A_S U(t, t_0) \end{aligned} \quad (35.19)$$

Várható értékek ugyanazok mindkét képben. A_H időfüggése, kapcsolat az Ehrenfest tétellel.

Fölcserélési relációk invariánsak a képváltásra

Konzervatív rendszer esetén a $H_H = H_S = H$

Térelméletben elsősorban a Heisenberg képet használjuk

36. Időfüggő perturbáció, kölcsönhatási kép

Nem zárt rendszer, és így nem is konzervatív. Legyen a H operátor $H = H_0 + K(t)$, ahol a K most időfüggő.

Ha $K(t)$ nem lenne, akkor ha $|\psi(0)\rangle = \sum c_n(0)|n\rangle$, ahol $|n\rangle$ -ek a H_0 sajátvektorai, akkor $|\psi(t)\rangle = \sum c_n(0)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}|n\rangle$. Ha viszont van K akkor célszerű az időfüggő megoldást a $|\psi(t)\rangle = \sum b_n(t)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}|n\rangle$ alakban keresni, ahol a b -k időfüggése amiatt lép föl, mert K is van.

Szorozzuk $|\psi(t)\rangle$ -t $e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}$ -vel, ami eltünteti a H_0 miatt föllépő időfejlődést és csak az a rész marad, ami a K miatt időfüggő. Ez az un. Dirac kép, vagy kölcsönhatási kép lényege. Vezessük be tehát a

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}|\psi(t)\rangle_S = \sum b_n(t)|n\rangle \quad (36.1)$$

vektorokat. Látható, hogy $|\psi(0)\rangle_I = |\psi(0)\rangle_S$. Ha érvényes az $A_S |\psi_S\rangle = |\tilde{\psi}_S\rangle$, és előírjuk, hogy analóg összeefüggés legyen érvényes a kölcsönhatási képbeli állapotokra, akkor természetesen az operátorokat is transzformálni kell. A(36.1)-ből

$$A_S |\psi_S\rangle = |\tilde{\psi}_S\rangle = A_S e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} |\psi_I\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} |\tilde{\psi}_I\rangle$$

Ezt szorozva jobbról $e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t}$ vel, látható, hogy $A_S |\psi_S\rangle = |\tilde{\psi}_S\rangle$ -el együtt $A_I |\psi_I\rangle = |\tilde{\psi}_I\rangle$ is érvényes ha

$$A_I = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} A_S e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \quad (36.2)$$

Egyszerűen megmutatható, hogy a várható értékeket és a kommutátorokat ez nem változtatja, azaz $\langle \psi_S | A_S | \psi_S \rangle = \langle \psi_I | A_I | \psi_I \rangle$, illetve ha $[A_S, B_S] = C_S$ akkor a megfelelő kölcsönhatási képbeli operátorokra $[A_I, B_I] = C_I$

A mozgásegyenlet, vagyis a Schrödinger egyenlet kölcsönhatási képből:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_I = -H_0 |\psi\rangle_I + e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} (H_0 + K) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} |\psi\rangle_I = K_I |\psi\rangle_I$$

Az operátorok időfüggése:

$$\frac{\partial A_I}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} H_0 A_I - \frac{i}{\hbar} A_I H_0 + \left(\frac{\partial A_S}{\partial t} \right)_I = \frac{i}{\hbar} [H_0, A_I] + \left(\frac{\partial A_S}{\partial t} \right)_I \quad (36.3)$$

	Schrödinger	Heisenberg	Kölcsönhatási	
állapot	változik: H_S	áll	változik: V_I	(36.4)
operátor	áll	változik: H_H	változik: H_0	

A dinamikai egyenlet megoldása kölcsönhatási képből:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum b_l(t) |n\rangle = K_I \sum b_l(t) |l\rangle \quad (36.5)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle k | \sum b_l(t) |l\rangle = \sum b_l(t) \langle k | K_I |l\rangle \quad (36.6)$$

vagy kihasználva az operátorok transzformációjára vonatkozó formulát a Schrödinger képből K_I -vel is kifejezhető.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} b_k(t) = \sum_l \langle k | K_I | l \rangle b_l(t) = \sum_l \langle k | K_S | l \rangle e^{i\omega_{kl}t} b_l(t) \quad (36.7)$$

ahol $\omega_{kn} = \omega_k - \omega_n$. Használjuk mostantól a

$$\langle k | K_S | l \rangle = K_{kl}$$

jelölést, és emlékezzünk, hogy ez a K_{kl} mátrixelem függ az időtől. Írjuk át a (36.7) egyenletet integrálegyenletté, úgy hogy legyen a kezdő időpont a $t = 0$.

$$b_k(t) = b_k(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \sum_l K_{kl} e^{i\omega_{kl}t_1} b_l(t_1) dt_1 \quad (36.8)$$

A megoldás egy lehetősége a fokozatos közelítés módszere. Sok stacionárius állapot esetén közelítőleg történik. A nulladik közelítésben $b_k^{(0)}(t) = b_k(0)$. Az első közelítést úgy kapjuk, hogy a jobb oldalon a $b_l(t_1)$ helyére a nulladik közelítést írjuk.

$$b_k^{(1)}(t) = b_k(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \sum_n K_{kl}(t_1) e^{i\omega_{kn}t_1} b_n(0) dt_1 \quad (36.9)$$

hasonlóan a második közelítésben

$$\begin{aligned} b_k^{(2)}(t) &= b_k(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \sum_l \langle k | K_S | n \rangle e^{i\omega_{kn}t_2} b_n^{(1)}(t_1) dt_1 = \\ &= b_k(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \sum_n \langle k | K_S | n \rangle e^{i\omega_{kn}t_1} b_n(0) dt_1 + \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_0^t \sum_n \langle k | K_S | n \rangle e^{i\omega_{kn}t_1} \int_0^{t_1} \sum_{n_1} \langle n | K_S | n_1 \rangle e^{i\omega_{nn_1}t_2} b_{n_1}(0) dt_2 dt_1 \end{aligned} \quad (36.10)$$

és így tovább. Az eredmény egy végtelen sor lesz de ezt nem írjuk itt ki, mert legtöbbször csak az első egy-két rendig számítjuk ki az eredményt. Ez várhatóan csak olyan időtartamokig ad megfelelő eredményt, amíg az együtthatók nem távolodnak el nagyon a kezdeti értéküktől. Ameddig ez igaz, addig működik az időfüggő perturbációs számítás ezen formája. Bizonyos esetekben ez nem kielégítő, elsősorban rezonáns kölcsönhatáskor, azaz ha a b -k egészen jelentősen megváltoznak. Ha valamelyik b pl. 0-ról 1-re változik, akkor viszont más, jobb közelítő eljárást

alkalmazunk.

Igen gyakran első rendig vizsgáljuk az eredményt abban az esetben, ha a kezdeti időpontban valamelyik b értéke 1, az összes többi 0. Ha a vizsgált kvantumrendszer egy atom, akkor külső zavar nélkül az rendszerint az alapállapotában tartózkodik. Legyen az induló állapot indexe $k = i$, azaz $b_i(0) = 1$, s így az összes többi b viszont 0, azaz $b_k(0) = \delta_{ik}$. Ekkor

$$b_k^{(1)}(t) = \delta_{ik} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t K_{ki} e^{i\omega_{ki}t_1} dt_1 \quad (36.11)$$

37. A lineáris polarizálhatóság elmélete

Legyen a külső tér most $K_S = -D\mathcal{E}(t)$, ahol D az atomi dipólmomentum operátora (Schrödinger képben), $\mathcal{E}(t) = E_0 \cos \omega t$ pedig időtől harmonikusan függő külső elektromos tér, pl. egy elektromágneses hullám, (fény) elektromos térerőssége. Sztatikus esetben tudjuk, hogy tényleg $-D\mathcal{E}$ alakú a kölcsönhatás, időben változó mező esetén viszont bizonyítani kell, hogy ez alkalmas leírás. Meg lehet mutatni, hogy ha az alkalmazott fény hullámhossza jóval nagyobb mint egy atom mérete, akkor az atomra ható külső mező térbeli változása elhanyagolható és a mezőtől származó kölcsönhatási tag valóban ilyen alakban vehető föl. A fenti alak helyett azonban egy némileg korrigált változatot vizsgálunk. Ha a külső teret kikapcsoljuk, akkor az alapállapot kivételével a többi állapot amplitúdója a spontán emisszió miatt exponenciálisan csökken. Azaz a 36.11-el elvivalens $\frac{\partial b_k^{(1)}(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \langle k | K_S | i \rangle e^{i\omega_{ki}t_1}$ helyett az

$$\frac{\partial b_k^{(1)}(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} K_{ki} e^{i\omega_{ki}t_1} - \gamma_k b_k^{(1)}(t) \quad (37.1)$$

egyenlet áll fönn, amely számot ad a $b_k^{(1)}(t)$ spontán emissziós csillapodásáról. Ezt a csillapítást le is lehet vezetni, ehhez azonban szigorúan véve a mezőt is kvantálni kellene. Mivel itt ezzel nem foglalkozunk a csillapítást kézzel tettük be. (Megjegyezzük még azt az érdekes adalékot, hogy szigorúan véve a spontán emisszió sem rövid időtartamokig sem a lecsengés végén nem exponenciális.) A 37.1 megoldása:

$$b_k^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} e^{-\gamma_k t} \int_0^t K_{ki} e^{i\omega_{ki}t_1} e^{\gamma_k t_1} dt_1 \quad k \neq i \quad (37.2)$$

A $K_S = -DE_0 \cos \omega t$ -vel $k \neq i$ -re

$$\begin{aligned} b_k^{(1)}(t) &= e^{-\gamma_k t} \frac{i E_0}{\hbar} \frac{1}{2} \int_0^t d_{ki} e^{i\omega_{ki} t_1} e^{\gamma_k t_1} (e^{i\omega t_1} + e^{-i\omega t_1}) dt_1 = \\ &= \frac{i E_0}{\hbar} \frac{1}{2} d_{ki} \left[\frac{e^{i(\omega_{ki} + \omega)t} - e^{-\gamma_k t}}{i(\omega_{ki} + \omega) + \gamma_k} + \frac{e^{i(\omega_{ki} - \omega)t} - e^{-\gamma_k t}}{i(\omega_{ki} - \omega) + \gamma_k} \right] \end{aligned} \quad (37.3)$$

ahol $d_{ki} = \langle k | D_S | i \rangle$ a dipólmomentum mátrixeleme, az un. átmeneti dipólmomentum, ez már nem függ az időtől, időfüggetlen. Mivel a γ_k általában 10^8 s^{-1} nagyságrendű, ha 10^{-8} s -nál jelentősen hosszabb gerjesztéseket nézünk, akkor az $e^{-\gamma_k t}$ -s tagok gyorsan lecsengenek, ezért ezeket elhagyhatjuk. Ha nem ez a helyzet, hanem olyan rövid impulzusokat tekintünk, amelyek időtartama $1/\gamma_k$ -val összemérhetőek, vagy ennél rövidebbek, akkor ez nem tehető meg, ilyenkor ezeket a tranzienseket is figyelembe kell venni.

Itt most a stacionárius esetet vizsgáljuk, amikor az $e^{-\gamma_k t}$ -s tagokat elhagyhatjuk, és ekkor

$$b_k^{(1)}(t) = \frac{E_0}{2} \frac{d_{ki}}{\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_{ki} + \omega)t}}{(\omega_{ki} + \omega) - i\gamma_k} + \frac{e^{i(\omega_{ki} - \omega)t}}{(\omega_{ki} - \omega) - i\gamma_k} \right] \quad (37.4)$$

Tegyük föl most, hogy az induló állapot az alapállapot. Ekkor ha atomról van szó azaz $d_{00} = 0$, tehát $b_i^{(1)}(t) = b_0^{(1)}(t) = 1$ és mint ismert, az alapállapot amplitúdója nem csillapodik, tehát $\gamma_0 = 0$. Ekkor a további amplitúdókra a fenti formulát használhatjuk, az $i = 0$ indexszel, és a Az időfüggő állapot első rendben a Schrödinger képen eszerint

$$|\psi_S^{(1)}(t)\rangle = |\varphi_0\rangle e^{-i\omega_0 t} + \sum b_k^{(1)}(t) e^{-i\omega_k t} |\varphi_k\rangle.$$

Az (1) első közelítés jelét mostantól nem írjuk ki, de az alábbi eredmények természetesen, csak első közelítésben érvényesekjelöléssel. Figyelembe véve, hogy $\omega_{k0} = \omega_k - \omega_0$

$$\begin{aligned} |\psi_S(t)\rangle &= |\varphi_0\rangle e^{-i\omega_0 t} + \sum b_k(t) e^{-i\omega_k t} |\varphi_k\rangle = \\ &= |\varphi_0\rangle e^{-i\omega_0 t} + \sum \frac{E_0}{2} \frac{d_{k0}}{\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_0 + \omega)t}}{(\omega_{k0} + \omega) - i\gamma_k} + \frac{e^{i(\omega_0 - \omega)t}}{(\omega_{k0} - \omega) - i\gamma_k} \right] |\varphi_k\rangle \end{aligned} \quad (37.5)$$

Számítsuk ki ezután a dipólusmomentum

$$p = \langle D \rangle (t) = \langle \psi_S(t) | D | \psi_S(t) \rangle \quad (37.6)$$

várható értékét. Az itt fellépő $d_{00} = \langle 0 | D_S | 0 \rangle$ mátrixelem viszont 0 és hasonlóan minden a $j = k$ mátrixelem is. mert ezek atomok esetén paritás okok miatt eltűnnek. Az E -ben lineáris tagokig bezárólag

$$\begin{aligned} \langle D \rangle (t) &= \sum 2 \operatorname{Re} \frac{E_0 d_{k0}}{2 \hbar} \left[\frac{e^{i\omega t}}{(\omega_{k0} + \omega) - i\gamma_k} + \frac{e^{-i\omega t}}{(\omega_{k0} - \omega) - i\gamma_k} \right] \langle \varphi_0 | D | \varphi_k \rangle = \\ &= \sum \frac{|d_{k0}|^2}{\hbar} E_0 \operatorname{Re} \left[\frac{e^{i\omega t}}{(\omega_{k0} + \omega) - i\gamma_k} + \frac{e^{-i\omega t}}{(\omega_{k0} - \omega) - i\gamma_k} \right] \end{aligned} \quad (37.7)$$

További számolással a

$$p = \alpha_c E_0 \cos \omega t + \alpha_s E_0 \sin \omega t \quad (37.8)$$

ahol az $\omega_{k0} + \omega = 2\omega$ közelítéssel, amely a rezonancia közelében érvényes:

$$\alpha_c(\omega) = \sum \frac{|d_{k0}|^2}{\hbar} \frac{(\omega_{k0} - \omega)}{(\omega_{k0} - \omega)^2 + \gamma_k^2} \quad (37.9)$$

$$\alpha_s(\omega) = \sum \frac{|d_{k0}|^2}{\hbar} \frac{2\gamma_k}{(\omega_{k0} - \omega)^2 + \gamma_k^2} \quad (37.10)$$

Ezek a diszperziós formulák, hasonlóak az atomok oszcilátormodelljéből kapható eredményhez. Rezonancia, (anomális diszperzió) van az $\omega_{k0} = \omega$ helyeken.

38. Szélessávú gerjesztés, az abszorbcio és indukált emisszió elemi tárgyalása

Vizsgáljuk meg a k -edik kifejtési együtthatót $k \neq i$, és az első közelítés jelét hagyjuk el:

$$b_k(t) = \frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle k | D | i \rangle \mathcal{E}(t') e^{i\omega_{ki}t'} dt' \quad (38.1)$$

Ha most $\mathcal{E}(t) = E_0 \cos \omega t = E_0(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})/2$, akkor első rendben

$$b_k(t) = \frac{1}{\hbar} \frac{d_{ki} E_0}{2} \left(\frac{e^{i(\omega_{ki} + \omega)t} - 1}{\omega + \omega_{ki}} + \frac{e^{i(\omega_{ki} - \omega)t} - 1}{\omega_{ki} - \omega} \right) \quad (38.2)$$

Látható, hogy a két tag közül az első akkor nagy, ha $\omega + \omega_{ki} \approx 0$, hiszen ekkor a nevező egyrészt kicsi, másrészt a számláló lassan változik. azaz átrendezve és \hbar -sal szorozva illetve $E_k = E_i - \hbar\omega$, ekkor a végállapot energiája $\hbar\omega$ -val kisebb mint a

kezdeti (indukált emisszió), a második viszont akkor, ha $E_k = E_i + \hbar\omega$, azaz, ha a végállapot energiája $\hbar\omega$ -val nagyobb mint a kezdeti (abszorpció).

Válasszuk az abszorpció leírását. Ekkor az első tagot elhagyhatjuk, a másodikból pedig a számlálót és nevezőt is $e^{-i(\omega_{ki}-\omega)t/2}$ -vel szorozva:

$$b_k(t) = \frac{d_{ki}E_0}{2\hbar} \frac{e^{i(\omega_{ki}-\omega)t/2} - e^{-i(\omega_{ki}-\omega)t/2}}{\omega_{ki} - \omega} = \frac{D_{ki}E_0}{\hbar} \frac{\sin[(\omega_{ki} - \omega)t/2]}{\omega_{ki} - \omega} \quad (38.3)$$

$$|b_k(t)|^2 = \left(\frac{d_{ki}E_0}{2\hbar} \right)^2 \frac{\sin^2[(\omega_{ki} - \omega)t/2]}{[(\omega_{ki} - \omega)/2]^2} \quad (38.4)$$

Ha tekintjük a $\frac{\sin^2[\alpha t/2]}{t(\alpha/2)^2} = t \frac{\sin^2[\alpha t/2]}{t^2(\alpha/2)^2}$ függvényt, az az $\alpha = 0$ helyen t , minden többi helyen viszont nyilván $\leq 1/t(\alpha/2)^2$ azaz nagy t -re mindenhol nullához tart, ha $\alpha \neq 0$. Mivel ezen kívül tetszőleges síma f függvényre $\lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \int f(\alpha) \frac{\sin^2[\alpha t/2]}{t(\alpha/2)^2} d\alpha = f(0)$. A $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2[\alpha t/2]}{(\alpha/2)^2} = 2\pi t \delta(\alpha)$ ahol $\delta(\alpha)$ a Dirac delta. Emiatt $|b_k(t)|^2 \sim t$ illetve az időegység alatt bekövetkező átmenet valószínűsége

$$w = \frac{1}{t} |b_k(t)|^2 = \frac{(d_{ki}E_0)^2}{2\hbar^2} \pi \delta(\omega_{ki} - \omega) \quad (38.5)$$

A perturbációszámítás természetesen csak addig lehet jó amíg $|b_k(t)|^2 \ll 1$ tehát az idő valójában nem lehet túl nagy, ha $\omega_{ki} - \omega \approx 0$

Ha a tér monokromatikus és rezonáns akkor ez a közelítés nem jó, rezonáns közelítés...

Polikromatikus, szélessávú gerjesztésnél viszont használható a fenti eredmény a következőmiatt: E_0^2 helyett $\int E^2(\omega) d\omega$ irandó, ahol síkhullámot tételeztünk föl. Így kapjuk, hogy

$$w = \int \frac{(d_{ki})^2}{2\hbar^2} E^2(\omega) \delta(\omega_{ki} - \omega) d\omega = \frac{d_{ki}^2}{2\hbar^2} E^2(\omega_{ki}) = \quad (38.6)$$

Emellett fejezzük ki ezt a mező energiasűrűségével:

$$\overline{u(\omega)} = \frac{1}{2} \varepsilon_0 \overline{E^2(\omega)} + \frac{1}{2\mu_0} \overline{B^2(\omega)} = \frac{1}{2} \varepsilon_0 E^2(\omega) \quad (38.7)$$

$$w = \frac{d_{ki}^2}{\hbar^2} \frac{\pi}{\varepsilon_0} u(\omega_{ki}) \quad (38.8)$$

Az $u(\omega_{ki})$ együtthatója lényegében az Einstein féle B_{ik} koefficiens az abszorpcióra j -ről a k -ra (itt most az induló állapot indexét írtuk előre) ha a nívók nem

degeneráltak. Valójában

$$B_{ik} = \frac{d_{ki}^2}{\hbar^2} \pi \frac{1}{3\varepsilon_0} \quad (38.9)$$

mert az $(\mathbf{ED})^2 = ED \cos^2 \theta$ átlaga a véletlen polarizáció miatt $\overline{\cos^2 \theta} = 1/3$ -os tényezőt hoz még be. A kvantummechanika lehetővé teszi tehát az Einstein által heurisztikusan bevezetett koefficiens kiszámítását. Mivel a (38.2) másik tagjával ugyanezt lehet tenni kiderül, hogy $B_{ki} = B_{ik}$ az abszorbcio és az indukált emisszió valószínűsége megegyezik.

Ez lehetővé teszi egyébként a spontán emisszió valószínűségének a meghatározását is, az alábbi módon. Itt Einstein 1917-es fenomenológiai megfontolásait használjuk, ahol a Planck törvény ismeretében kapcsolatot teremtett a spontán emisszió, az abszorbcio és az indukált emisszió együtthatói között, de ezek explicit alakját másállandókkal még nem ismerte, mert azokat csak a kvantummechanika alapján lehet megadni. A spontán emisszió együtthatójának egzakt kvantummechanikai levezetése Dirac érdeme (1927), majd ezt fejlesztették tovább Weisskopf és Wigner. Itt tehát Einsteint követve hivatkozunk a Planck törvényre, amelynek a levezetését itt nem tárgyaljuk részletesen, mert a statisztikus fizika mint ideális fotongázt tárgyalja ezt, csak vázoljuk a levezetést. Egy nagy üregben, azaz szabad térben a módussűrűség $g(\omega)d\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega$, emiatt ha az ω frekvenciájú módusokban n_ω számú foton van, akkor ennek a módusnak a teljes energiája $\hbar\omega n_\omega$, az ω frekvencián jelenlévő fotonok energisűrűsége $u(\omega) = \hbar n_\omega g(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} n_\omega$. A statisztikus fizika szerint tömeg nélküli bozonokra, azaz pl. fotonokra is: $n_\omega = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}$, vagyis

$$u(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \quad (38.10)$$

Ha egy atomi rendszer egyensúlyban van a sugárzással, és N_k atom van a k -adik magasabb és N_i az i -edik alacsonyabb energiájú állapotban, akkor

$$(B_{ki}u(\omega) + A_{ki})N_k = B_{ik}u(\omega)N_i \quad (38.11)$$

amiből $u(\omega) = \frac{A_{ki}N_k}{B_{ik}N_i - B_{ki}N_k} = \frac{A_{ki}}{B_{ik}\frac{N_i}{N_k} - B_{ki}} = \frac{A_{ki}}{B_{ik}} \frac{1}{\frac{N_i}{N_k} - \frac{B_{ki}}{B_{ik}}}$. Ám egyensúlyban Boltzmann szerint, minden atomot külön rendszernek tekintve: $\frac{N_k}{N_i} = \frac{g_k}{g_i} e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}$. Ezt összehasonlítva a Planck törvénnyel kapjuk, hogy

$$\frac{A_{ki}}{B_{ik}} \frac{1}{\frac{g_i}{g_k} e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - \frac{B_{ki}}{B_{ik}}} = \frac{A_{ki}}{B_{ik}} \frac{g_k/g_i}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - \frac{g_k B_{ki}}{g_i B_{ik}}}$$

egyrészt $g_k B_{ki} = g_i B_{ik}$ továbbá:

$$A_{ki} = B_{ik} \frac{g_i \hbar \omega^3}{g_k \pi^2 c^3} = B_{ki} \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \quad (38.12)$$

Ebből a spontán emissziós együtthatót is meg tudjuk határozni

$$A_{ki} = \frac{1}{3\pi\epsilon_0} \frac{d_{ki}^2 \omega^3}{\hbar c^3} = \frac{g_i}{g_k} \left[\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right] \frac{4}{3} \frac{d_{ki}^2 \omega^3}{\hbar c^3} \quad (38.13)$$

Pl H atomra az 1s és 2p állapotok között $g_i = 1$ $g_k = 3$ mivel a p állapotok háromszor degeneráltak. Viszont minden alnívóra ugyanaz a B_{ik} így valójában a teljes $\tilde{B}_{ik} = 3B_{ik}$

Ezt az állandót Dirac 1927-ben szigorúbb eljárással is levezette a mező kvantálása alapján ami nálunk implicite a Planck törvény segítségével hoztuk be. Rezonáns gerjesztés esetén a perturbatív eljárás nem jó, egyensúly nincs stb. ott más módszereket használunk. Ld. fény-anyag kölcsönhatás részletesebb kvantumoptikai elmélete.

39. A mágneses rezonancia, a Rabi probléma

Feles spint vizsgálunk forgó mágneses mezőben. A kísérleti megvalósítás során ezek atommagok pl. protonok spinjei amelyek egymástól függetlenül egyenként viselkednek az alább leírandó módon.

$$\mathbf{B} = B_0 \hat{z} + B_1 (\hat{x} \cos \omega t + \hat{y} \sin \omega t) \quad (39.1)$$

Sztatikus \hat{z} irányú mágneses mező + az x y síkban forgó B_1 nagyságú gyöngébb tér.

Az energia $H = -MB$ a Hamilton operátor $H = -\gamma \mathbf{S} \mathbf{B}$ ahol γ a giromágneses hányados. Elektronra ez a spinnel kapcsolatban $g \frac{q}{2m}$, ahol g nagyon közel van 2-höz, más részecskék esetén az eltérés jóval nagyobb lehet.

$$H = -\gamma (S_x B_x + S_y B_y + S_z B_z), \quad (39.2)$$

Mint az impulzusmomentum illetve a feles spin ($j = 1/2$) elméletéből ismert, abban a $|j = 1/2, m = \pm 1/2\rangle =: |\pm\rangle$ ortonormált bázisban amelyben S_z diagonális

spinoperátorok alakja

$$S_z = \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|), \quad (39.3)$$

$$S_x = \frac{S_+ + S_-}{2} = \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|), \quad (39.4)$$

$$S_y = \frac{S_+ - S_-}{2i} = i\frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle-| - |-\rangle\langle+|), \quad (39.5)$$

tehát

$$H = -\gamma\frac{\hbar}{2}\{B_0(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|) + B_1 \cos\omega t(|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|) + iB_1 \sin\omega t(|+\rangle\langle-| - |-\rangle\langle+|)\} \quad (39.6)$$

Itt az első, $B_0 - t$ tartalmazótag a H_0 , a másik két tag együtt az időfüggő $K_S(t) = K$ operátor. Legyen $-\gamma\frac{\hbar}{2}B_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}$ akkor

$$H_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|), \quad H_0|\pm\rangle = \pm\frac{\hbar\omega_0}{2} \quad (39.7)$$

Legyen továbbá $-\gamma\frac{\hbar}{2}B_1 = \frac{\hbar\Omega_0}{2}$. Így

$$\begin{aligned} K_S(t) &= \frac{\hbar\Omega_0}{2}\{|+\rangle\langle-|(\cos\omega t + i\sin\omega t) + |-\rangle\langle+|(\cos\omega t + i\sin\omega t)\} = \\ &= \frac{\hbar\Omega_0}{2}(S_+e^{i\omega t} + S_-e^{-i\omega t}) \end{aligned} \quad (39.8)$$

Keressük a Schrödinger egyenlet megoldását kölcsönhatási képből $|\Psi_I\rangle = b_+(t)|+\rangle + b_-(t)|-\rangle$, ahol $|b_+(t)|^2 + |b_-(t)|^2 = 1$. A mozgásegyenlet kölcsönhatási képből, általában :

$$i\hbar\dot{b}_j = \sum_l \langle j|K_S|l\rangle e^{i\omega_{jl}t} b_l \quad (39.9)$$

Itt

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{b}_+ &= \frac{\hbar\Omega_0}{2}\{ \langle+|S_+e^{i\omega t} + S_-e^{-i\omega t}|+\rangle b_+ + \langle+|S_+e^{i\omega t} + S_-e^{-i\omega t}|-\rangle b_- e^{i\omega_+ - t} e^{-i\omega t} \} = \\ &= \frac{\hbar\Omega_0}{2}e^{i(\omega_0 - \omega)t} b_- \end{aligned} \quad (39.10)$$

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{b}_- &= \frac{\hbar\Omega_0}{2}\{ \langle-|S_+e^{i\omega t} + S_-e^{-i\omega t}|+\rangle b_+ e^{i\omega_- + t} + \langle-|S_+e^{i\omega t} + S_-e^{-i\omega t}|-\rangle b_- e^{i\omega_- + t} \} = \\ &= \frac{\hbar\Omega_0}{2}e^{i(\omega - \omega_0)t} b_+ \end{aligned} \quad (39.11)$$

mivel $\langle +|S_{\pm}|+\rangle = \langle -|S_{\pm}|-\rangle = \langle -|S_+|+\rangle = \langle +|S_-|-\rangle = 0$, és $\omega_{+-} = \omega_+ - \omega_- = \omega_0 = -\omega_{-+}$. Vezessük be az

$$\omega_0 - \omega = \Delta \quad (39.12)$$

jelölést, amely tehát a + és - spinsajátállapotok közötti Bohr frekvencia és a B_1 mező körfrekvenciájának különbsége. Ezekkel:

$$\begin{aligned} i\dot{b}_+ &= \frac{\Omega_0}{2} e^{i\Delta t} b_- \\ i\dot{b}_- &= \frac{\Omega_0}{2} e^{-i\Delta t} b_+ \end{aligned} \quad (39.13)$$

ahol tehát Ω_0 a kívülről alkalmazott B_1 mező erősségével arányos, Δ pedig a + és - spinsajátállapotok közötti Bohr frekvencia és a B_1 forgó mező körfrekvenciájának különbsége. Ez a differenciálegyenletrendszer egyszerűen megoldható. Deriváljuk pl. az első egyenletet még egyszer, és a föllépő \dot{b}_- -t ill \dot{b}_+ -t fejezzük ki a második és az első egyenletből:

$$\begin{aligned} i\ddot{b}_+ &= i\Delta \frac{\Omega_0}{2} e^{i\Delta t} b_- + \frac{\Omega_0}{2} e^{i\Delta t} \dot{b}_- = i\Delta \frac{\Omega_0}{2} e^{i\Delta t} \frac{i\dot{b}_+}{\frac{\Omega_0}{2} e^{i\Delta t}} + \frac{\Omega_0}{2} e^{i\Delta t} \left(-i \frac{\Omega_0}{2} e^{-i\Delta t} b_+\right) = \\ &= -\dot{b}_+ - i \frac{\Omega_0^2}{4} b_+ \end{aligned} \quad (39.14)$$

Ebből rendezéssel

$$\ddot{b}_+ - i\Delta \dot{b}_+ + \frac{\Omega_0^2}{4} b_+ = 0 \quad (39.15)$$

A megoldást a szokásos $e^{\alpha t}$ alakban keresve, a karakterisztikus egyenlet

$$\alpha^2 - i\Delta\alpha + \frac{\Omega_0^2}{4} = 0, \quad (39.16)$$

amelyből a gyökök,

$$\alpha_{12} = \frac{i\Delta}{2} \pm i\sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + \frac{\Omega_0^2}{4}} =: \frac{i\Delta}{2} \pm i\frac{\Omega}{2} \quad (39.17)$$

Az általános megoldás így

$$b_+ = c_1 e^{\alpha_1 t} + c_2 e^{\alpha_2 t} \quad (39.18)$$

$$b_- = \frac{2i}{\Omega_0} \dot{b}_+ e^{-i\Delta t} = \frac{2i}{\Omega_0} (c_1 \alpha_1 e^{\alpha_1 t} + c_2 \alpha_2 e^{\alpha_2 t}) e^{-i\Delta t} \quad (39.19)$$

c_1 és c_2 t a kezdeti föltételek szabják meg. Pl. ha $t = 0$ esetén a spin az alsó $|-\rangle$

állapotban volt, akkor

$$0 = b_+(0) = c_1 + c_2 \quad (39.20)$$

$$1 = b_-(0) = \frac{2i}{\Omega_0}(c_1\alpha_1 + c_2\alpha_2) = \frac{2i}{\Omega_0}(\alpha_1 - \alpha_2)c_1 = \frac{2i}{\Omega_0}i\Omega c_1 \quad (39.21)$$

alapján $c_1 = -\frac{\Omega_0}{2\Omega}$, $c_2 = -\frac{\Omega_0}{2\Omega}$,

$$b_+ = \frac{\Omega_0}{2\Omega}e^{\frac{i\Delta}{2}t}(e^{i\Omega t} - e^{-i\Omega t}) = -i\frac{\Omega_0}{\Omega}\left(\sin\frac{\Omega}{2}t\right)e^{\frac{i\Delta}{2}t} \quad (39.22)$$

Annak valószínűsége, hogy a spin a felső állapotba kerül:

$$|b_+|^2 = \left(\frac{\Omega_0}{\Omega}\right)^2 \sin^2\frac{\Omega}{2}t = \left(\frac{\Omega_0}{\Omega}\right)^2 (1 - \cos\Omega t) \quad (39.23)$$

Azaz Ω körfrekvenciával oszcillál, ezt nevezzük Rabi oszcillációnak, I. I. Rabi nyomán, (aki a történelmi Magyarországon, a Felvidéken született, de még gyermekként az USA-ba került és) aki ott kapott Nobel díjat a molekulanyaláb módszerért, amelyben ezt az elméletet molekulák mágneses momentumának meghatározására használta.

Megjegyezzük, hogy hasonló egyenletek írják le egy atom két stacionárius állapota közötti a megfelelő átmenettel rezonáns elektromágneses hullám hatására létrejövő időbeli változást. Ezek az úgynevezett optikai Rabi oszcillációk is megfigyelhetők megfelelő körülmények között.

Feladat: adjuk meg az általános megoldást teteszöleges $b_+(0)$ és $b_-(0)$ esetén mátrix alakban.

