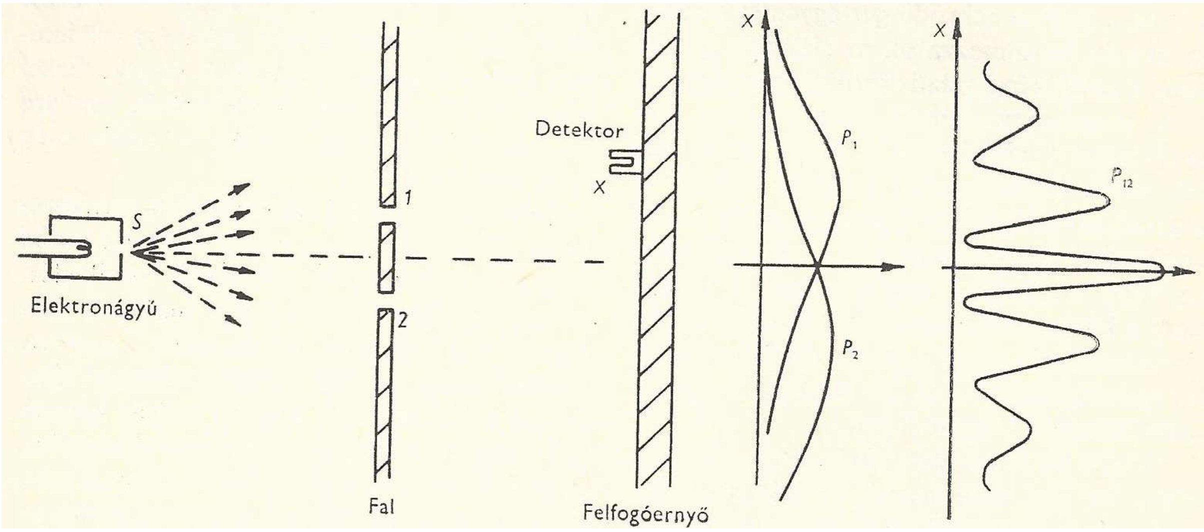
Szemelvények a Kvantummechanika 1 előadás anyagából

Szunyogh László

2019. május 6.

1. Kétréses elektron interferencia kísérlet

A kísérletet Claus Jönsson német fizikus végezte el 1960-ban, eredményeit 1961-ben publikálta.



R.P. Feynmann - R.B. Leighton - M. Sands: Modern Fizika (Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1986) 8. kötet 94.1 ábra másolata

Kezdeti állapot: az elektron az S forrásból indul.

Végállapot: az elektront az ernyő X pontjában detektáljuk.

Esemény: Meghatározott a kezdeti és végállapot, azaz az elektron az S forrásból indul és az X pontba érkezik. Az esemény *két, egymást kizáró mód*on jöhet létre: az elektron az 1-es vagy a 2-es résen halad át.

1. posztulátum: Egy eseményhez egy komplex értékű $\psi\,(\mathrm{S},\mathrm{X})$ valószínűségi amplitúdó rendelhető, mely abszolút értékének négyzete adja meg az esemény bekövetkezésének valószínűségét:

$$P\,(\mathrm{S},\mathrm{X}) = |\psi\,(\mathrm{S},\mathrm{X})|^2$$

2. posztulátum: Ha az esemény két, egymást kizáró módon jöhet létre, melyekhez a $\psi_1\,(\mathrm{S},\mathrm{X})$ és $\psi_2\,(\mathrm{S},\mathrm{X})$ valószínűségi amplitúdók rendelhetők, akkor az esemény valószínűségi amplitúdója ezek összege,

$$\psi\,(\mathrm{S},\mathrm{X}) = \psi_1\,(\mathrm{S},\mathrm{X}) + \psi_2\,(\mathrm{S},\mathrm{X}) \ ,$$

és az esemény valószínűsége,

$$\begin{aligned}P_{12}(\mathrm{S},\mathrm{X}) &= |\psi_1(\mathrm{S},\mathrm{X}) + \psi_2(\mathrm{S},\mathrm{X})|^2 \\ &= |\psi_1(\mathrm{S},\mathrm{X})|^2 + |\psi_2(\mathrm{S},\mathrm{X})|^2 + 2\,\mathrm{Re}\left(\psi_1(\mathrm{S},\mathrm{X})\,\psi_2(\mathrm{S},\mathrm{X})\right) \\ &= P_1(\mathrm{S},\mathrm{X}) + P_2(\mathrm{S},\mathrm{X}) + 2\,\mathrm{Re}\left(\psi_1(\mathrm{S},\mathrm{X})\,\psi_2(\mathrm{S},\mathrm{X})\right)\ .\end{aligned}$$

Az egyszerűség kedvéért, tegyük fel, hogy $\psi_1(\mathrm{S},\mathrm{X}) \propto \frac{e^{ikl_1}}{l_1}$ és $\psi_2(\mathrm{S},\mathrm{X}) \propto \frac{e^{ikl_2}}{l_2}$, ahol $k = \frac{p}{\hbar}$ a p impulzusú elektron hullámszáma, l_1 és l_2 pedig rendre az 1-es és 2-es rés távolsága az X ponttól. Ekkor $l_1 \simeq l_2$ esetén,

$$\psi_1(\mathrm{S},\mathrm{X}) + \psi_2(\mathrm{S},\mathrm{X}) \propto \frac{e^{ikl_1}}{l_1} + \frac{e^{ikl_2}}{l_2} \simeq \frac{e^{ikl_1} + e^{ikl_2}}{l_1} = \frac{e^{ikl_1}}{l_1}\left(1 + e^{ik\Delta l}\right)$$

és

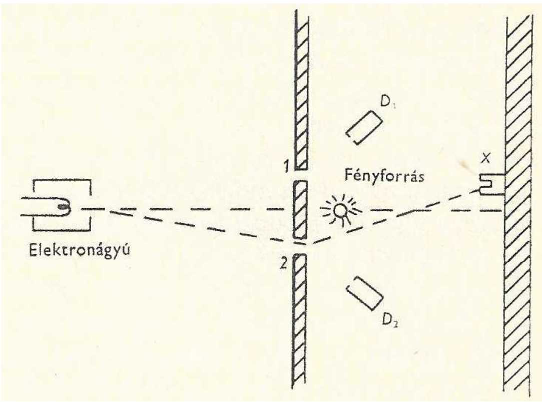
$$P_{12} = P_1 \left|1 + e^{ik\Delta l}\right|^2 = 2P_1\left(1 + \cos k\Delta l\right)\ ,$$

ahol $\Delta l = l_2 - l_1$. Ha tehát $\Delta l = \frac{2\pi n}{k} = n\lambda$ $(n \in \mathbb{Z})$, akkor $P = 4P_1$ (lokális maximumot látunk az ernyőn), ha $\Delta l = \frac{\pi(2n+1)}{k} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\lambda$ $(n \in \mathbb{Z})$, akkor $P = 0$ (zérus intenzitást látunk az ernyőn).

3. posztulátum: Ha olyan kísérlet végzünk, mellyel eldönthető, hogy a két egymást kizáró lehetőség közül melyik valósul meg, akkor nincsen interferencia, azaz

$$P(\mathrm{S},\mathrm{X}) = P_1(\mathrm{S},\mathrm{X}) + P_2(\mathrm{S},\mathrm{X})\ .$$

Nézzünk a 3. posztulátum mélyére! Próbáljuk meg az elektron áthaladási helyét úgy meghatározni, hogy a rések mögé egy fényforrást (fotonforrást) teszünk és az elektronról szóródó fotont a D_1 és D_2 detektorokban észleljük.



R.P. Feynmann - R.B. Leighton - M. Sands: Modern Fizika (Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1986) 8. kötet 94.3 ábra másolata

Ebben az esetben az esemény végállapotát már nem csak az jellemzi, hogy az elektron az X pontba csapódott be, hanem az is, hogy a szóródó fotont a D_1 vagy a D_2 detektorban észleljük. Legyen α és β annak a valószínűségi amplitúdója, hogy az 1-es résen áthaladó elektronról szóródó fotont a D_1 vagy a D_2 detektorban észleljük! A berendezés szimmetriáját kihasználva, annak a valószínűségi amplitúdója, hogy a 2-es résen áthaladó elektronon szóródó foton a D_1 vagy a D_2 detektorban észleljük, rendre β és α.

Annak a valószínűségi amplitúdója tehát, hogy az elektront az X pontban, a fotont pedig a D_1 detektorban detektáljuk,

$$\psi\left(\mathrm{S},\mathrm{X},\mathrm{D}_1\right) = \alpha\psi_1\left(\mathrm{S},\mathrm{X}\right) + \beta\psi_2\left(\mathrm{S},\mathrm{X}\right)$$

és ugyanígy, ha az elektront az X pontban, a fotont pedig a D_2 detektorban detektáljuk, a valószínűségi amplitúdó

$$\psi\left(\mathrm{S},\mathrm{X},\mathrm{D}_2\right) = \beta\psi_1\left(\mathrm{S},\mathrm{X}\right) + \alpha\psi_2\left(\mathrm{S},\mathrm{X}\right) ,$$

ahol egyrészt felhasználtuk a 2. posztulátumot, valamint azt, hogy a feltételes események (pl. az elektron az 1-es résen halad át és a róla szóródó foton a D_1 detektorban landol) valószínűségi amplitúdói összeszorzódnak.

Ha a foton detektálását úgy finomítjuk (a fény hullámhosszának csökkentésével), hogy az 1-es résen áthaladó elektronon szóródó fotont jóval nagyobb valószínűséggel detektáljuk D_1-ben, mint D_2-ben , és ugyanúgy, a 2-es résen áthaladó elektronon szóródó fotont jóval nagyobb valószínűséggel detektáljuk D_2-ben, mint D_1-ben ($\alpha \gg \beta$), (közel) egyértelműen meghatározható az elektron áthaladási helye. Annak a valószínűsége ugyanis, hogy a fotont D_1-ben detektáljuk,

$$\left|\psi\left(\mathrm{S},\mathrm{X},\mathrm{D}_1\right)\right|^2 \underset{\alpha\gg\beta}{\rightarrow} \left|\alpha\right|^2 \left|\psi_1\left(\mathrm{S},\mathrm{X}\right)\right|^2 \propto P_1$$

illetve, hogy a fotont D_2-ben detektáljuk,

$$\left|\psi\left(\mathrm{S},\mathrm{X},\mathrm{D}_2\right)\right|^2 \underset{\alpha\gg\beta}{\rightarrow} \left|\alpha\right|^2 \left|\psi_2\left(\mathrm{S},\mathrm{X}\right)\right|^2 \propto P_2 .$$

Annak a teljes valószínűsége, hogy az elektron az X pontba csapódik, de minden kísérletnél tudjuk, hogy melyik résen halad át (azaz a fotont melyik detektorban észleljük), a fenti két valószínűség összege:

$$P_{12} = \left|\alpha\right|^2 \left(\left|\psi_1\left(\mathrm{S},\mathrm{X}\right)\right|^2 + \left|\psi_2\left(\mathrm{S},\mathrm{X}\right)\right|^2\right) \propto P_1 + P_2 .$$

Itt ügyelnünk kellett arra, hogy *két független esemény*ről van szó, melyek valószínűségei összeadódnak és semmiképpen sem szabad a valószínűségi amplitúdókat összeadni, mint *egy esemény két egymást kizáró megvalósulása* esetén:

$$\begin{aligned} P_{12} &= \left|\psi\left(\mathrm{S},\mathrm{X},\mathrm{D}_1\right)\right|^2 + \left|\psi\left(\mathrm{S},\mathrm{X},\mathrm{D}_2\right)\right|^2 \\ &\neq \left|\psi\left(\mathrm{S},\mathrm{X},\mathrm{D}_1\right) + \psi\left(\mathrm{S},\mathrm{X},\mathrm{D}_2\right)\right|^2 ! \end{aligned}$$

2. Hőmérsékleti sugárzás

2.1. Elektromágneses hullámok vákuumban

Maxwell egyenletek vákuumban:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \vec{E} &= 0 \\ \operatorname{rot} \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \operatorname{div} \vec{B} &= 0 \\ \operatorname{rot} \vec{B} &= \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \end{aligned}$$

$$\Downarrow$$

$$\operatorname{rot}\operatorname{rot}\vec{E} = -\mu_0\varepsilon_0\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2}$$

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{klm}\partial_j\partial_l E_m = (\delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl})\,\partial_j\partial_l E_m = \partial_j\partial_i E_j - \partial_l\partial_l E_i$$

$$\operatorname{rot}\operatorname{rot}\vec{E} = \operatorname{grad}\operatorname{div}\vec{E} - \Delta\vec{E} = -\Delta\vec{E}$$

$$\Downarrow$$

Hullámegyenlet

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2}\partial_t^2\right)\vec{E} = 0$$

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2}\partial_t^2\right)\vec{B} = 0$$

ahol

$$c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0\varepsilon_0}}$$

Szabad (határfeltételek nélküli) monokromatikus megoldás:

$$\vec{E}\,(\vec{r},t) = \vec{E}_0\sin\left(\vec{k}\vec{r} - \omega t + \varphi\right)$$

$$\vec{B}\,(\vec{r},t) = \vec{B}_0\sin\left(\vec{k}\vec{r} - \omega t + \varphi\right)$$

$$ck = c\frac{2\pi}{\lambda} = \omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi}{T} \to \lambda = cT$$

$$\operatorname{rot}\vec{E} = \left(\vec{k}\times\vec{E}_0\right)\cos\left(\vec{k}\vec{r} - \omega t + \varphi\right)$$

$$\frac{\partial\vec{B}}{\partial t} = -\omega\vec{B}_0\cos\left(\vec{k}\vec{r} - \omega t + \varphi\right)$$

Innen

$$\vec{B}_0 = \frac{1}{c}\left(\vec{n}\times\vec{E}_0\right)$$

ahol $\vec{n} = \vec{k}/k$ ($|\vec{n}| = 1$). Ugyanígy:

$$\vec{n}\times\vec{B}_0 = -\frac{\vec{E}_0}{c}$$

Innen

$$\vec{n}\times\left(\vec{n}\times\vec{E}_0\right) = -\vec{E}_0$$

$$\vec{n}(\vec{n}\vec{E}_0) - \vec{E}_0 = -\vec{E}_0 \to \vec{n}\vec{E}_0 = 0$$

és

$$\vec{n}\vec{B}_0 = 0$$

A $\vec{k}$, $\vec{E}_0$ és $\vec{B}_0$ vektorok egy jobbsodrású derékszögű koordinátarendszer x, y és z tengelyeivel párhuzamosak. A $\vec{B}_0$ és $\vec{E}_0$ vektorokra két független irány választható $\to$ két polarizáció. A terek amplitúdóira fennáll:

$$cB_0 = E_0\,.$$

2.2. Sugárzási tér kockaalakú üregben

Az *a élhosszúságú, fémfalú üres kockában*, $[0,a]^3$, az elektromos térerősség falakkal párhuzamos és a mágneses indukció falakra merőleges komponense minden időpillanatban zérus:

$$\begin{aligned} E_y = E_z = 0 \quad &\text{ha} \quad x = 0 \text{ vagy } x = a \\ E_x = E_z = 0 \quad &\text{ha} \quad y = 0 \text{ vagy } y = a \\ E_x = E_y = 0 \quad &\text{ha} \quad z = 0 \text{ vagy } z = a \end{aligned}$$

A fenti határfeltételeket teljesítő általános megoldások:

$$\begin{aligned} E_x(\vec{r},t) &= \sum_{\vec{n}} E_{x,\vec{n}}(t) \cos\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{a}\right) \\ E_y(\vec{r},t) &= \sum_{\vec{n}} E_{y,\vec{n}}(t) \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{a}\right) \\ E_z(\vec{r},t) &= \sum_{\vec{n}} E_{z,\vec{n}}(t) \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right) \cos\left(\frac{n_z \pi z}{a}\right) \end{aligned}$$

ahol $\vec{n} \in \mathbb{N}_0^3 \backslash [(0,0,0) \cup (\mathbb{N},0,0) \cup (0,\mathbb{N},0) \cup (0,0,\mathbb{N})]$, azaz $\vec{n}$ legalább két komponense különbözik zérustól. Mivel $\operatorname{div} \vec{E}(\vec{r},t) = 0 \quad \forall \vec{r} \in [0,a]^3$,

$$\sum_{\vec{n}} \left(n_x E_{x,\vec{n}}(t) + n_y E_{y,\vec{n}}(t) + n_z E_{z,\vec{n}}(t)\right) \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{a}\right) = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\vec{n}\, \vec{E}_{\vec{n}}(t) = 0\,.$$

Számítsuk ki a mágneses indukciót is:

$$\begin{aligned} \left[\operatorname{rot} \vec{E}(\vec{r},t)\right]_x &= \partial_y E_z(\vec{r},t) - \partial_z E_y(\vec{r},t) \\ &= \sum_{\vec{n}} E_{z,\vec{n}}(t) \frac{n_y \pi}{a} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right) \cos\left(\frac{n_z \pi z}{a}\right) \\ &- \sum_{\vec{n}} E_{y,\vec{n}}(t) \frac{n_z \pi}{a} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right) \cos\left(\frac{n_z \pi z}{a}\right) \\ &= \sum_{\vec{n}} \left[\vec{n} \times \vec{E}_{\vec{n}}(t)\right]_x \frac{\pi}{a} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right) \cos\left(\frac{n_z \pi z}{a}\right) \end{aligned}$$

valamint

$$\begin{aligned} \left[\operatorname{rot} \vec{E}(\vec{r},t)\right]_y &= \sum_{\vec{n}} \left[\vec{n} \times \vec{E}_{\vec{n}}(t)\right]_y \frac{\pi}{a} \cos\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right) \cos\left(\frac{n_z \pi z}{a}\right) \\ \left[\operatorname{rot} \vec{E}(\vec{r},t)\right]_z &= \sum_{\vec{n}} \left[\vec{n} \times \vec{E}_{\vec{n}}(t)\right]_z \frac{\pi}{a} \cos\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{a}\right) \end{aligned}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{aligned} B_x(\vec{r},t) &= \sum_{\vec{n}} B_{x,\vec{n}}(t) \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right) \cos\left(\frac{n_z \pi z}{a}\right) \\ B_y(\vec{r},t) &= \sum_{\vec{n}} B_{y,\vec{n}}(t) \cos\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right) \cos\left(\frac{n_z \pi z}{a}\right) \\ B_z(\vec{r},t) &= \sum_{\vec{n}} B_{z,\vec{n}}(t) \cos\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{a}\right) \end{aligned}$$

ahol
$$\frac{d\vec{B}_{\vec{n}}\left(t\right)}{dt} = -\frac{\pi}{a}\left(\vec{n}\times\vec{E}_{\vec{n}}\left(t\right)\right)$$
és a falakon a mágneses indukció lapokra merőleges komponense valóban eltűnik.

Legyen $\vec{\varepsilon}_{\vec{n}}^{1}$ és $\vec{\varepsilon}_{\vec{n}}^{2}$ az $\vec{n}$ vektorra merőleges két független (transzverzális) irányvektor:
$$\vec{\varepsilon}_{\vec{n}}^{1}\perp\vec{n}\ ,\ \vec{\varepsilon}_{\vec{n}}^{2}\perp\vec{n}\ ,\ \vec{n}\times\vec{\varepsilon}_{\vec{n}}^{1} = \left|\vec{n}\right|\,\vec{\varepsilon}_{\vec{n}}^{2}\ ,\ \vec{n}\times\vec{\varepsilon}_{\vec{n}}^{1} = -\left|\vec{n}\right|\,\vec{\varepsilon}_{\vec{n}}^{1}\ .$$
Ekkor
$$\vec{E}_{\vec{n}}\left(t\right) = \vec{\varepsilon}_{\vec{n}}^{1}\,q_{\vec{n}}^{1}\left(t\right) + \vec{\varepsilon}_{\vec{n}}^{2}\,q_{\vec{n}}^{2}\left(t\right)$$
ahol a $q_{\vec{n}}^{1}\left(t\right)$ és $q_{\vec{n}}^{2}\left(t\right)$ *transzverzális módusok*at a hullámegyenletből határozzuk meg:
$$\left[\vec{\varepsilon}_{\vec{n}}^{1}\,q_{\vec{n}}^{1}\left(t\right) + \vec{\varepsilon}_{\vec{n}}^{2}\,q_{\vec{n}}^{2}\left(t\right)\right]\left(n_x^2+n_y^2+n_z^2\right)\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 + \frac{1}{c^2}\left[\vec{\varepsilon}_{\vec{n}}^{1}\,\ddot{q}_{\vec{n}}^{1}\left(t\right) + \vec{\varepsilon}_{\vec{n}}^{2}\,\ddot{q}_{\vec{n}}^{2}\left(t\right)\right] = 0$$
amiből a módusokra a
$$\ddot{q}_{\vec{n}}^{s}\left(t\right) + \omega_{\vec{n}}^2\,q_{\vec{n}}^{s}\left(t\right) = 0 \quad \left(s = 1, 2\right)$$
oszcillátor-egyenlet adódik a
$$\nu_{\vec{n}} = \frac{\omega_{\vec{n}}}{2\pi} = \frac{c}{2a}\sqrt{n_x^2+n_y^2+n_z^2} = \frac{c\left|\vec{n}\right|}{2a}$$
frekvenciával. A megoldások:
$$q_{\vec{n}}^{s}\left(t\right) = q_{\vec{n}}^{s}\left(0\right)\cos\left(\omega_{\vec{n}}t+\varphi_{\vec{n}}^{s}\right)$$
ahol a $q_{\vec{n}}^{s}\left(0\right)$ amplitúdók tetszőlegesen választhatók. A terek amplitúdói:
$$\vec{E}_{\vec{n}}\left(t\right) = \vec{\varepsilon}_{\vec{n}}^{1}\,q_{\vec{n}}^{1}\left(0\right)\cos\left(\omega_{\vec{n}}t+\varphi_{\vec{n}}^{1}\right) + \vec{\varepsilon}_{\vec{n}}^{2}\,q_{\vec{n}}^{2}\left(0\right)\cos\left(\omega_{\vec{n}}t+\varphi_{\vec{n}}^{2}\right)$$
és
$$\vec{B}_{\vec{n}}\left(t\right) = \frac{1}{c}\left(-\vec{\varepsilon}_{\vec{n}}^{2}\,q_{\vec{n}}^{1}\left(0\right)\sin\left(\omega_{\vec{n}}t+\varphi_{\vec{n}}^{1}\right) + \vec{\varepsilon}_{\vec{n}}^{1}\,q_{\vec{n}}^{2}\left(0\right)\sin\left(\omega_{\vec{n}}t+\varphi_{\vec{n}}^{2}\right)\right)\ .$$
Az EM tér energiasűrűsége,
$$\begin{aligned} w_E\left(\vec{r},t\right) &= \frac{\varepsilon_0}{2}\vec{E}\left(\vec{r},t\right)^2 + \frac{1}{2\mu_0}\vec{B}\left(\vec{r},t\right)^2 \\ &= \frac{\varepsilon_0}{2}\left(\vec{E}\left(\vec{r},t\right)^2 + c^2\vec{B}\left(\vec{r},t\right)^2\right)\ , \end{aligned}$$
amit a kocka térfogatára kiintegrálva kapjuk az EM tér energiáját. Kihasználva a sin és cos függvények ortogonalitását valamint, hogy a $\sin^2$ és $\cos^2$ függvények integrálja a $[0,a]$ intervallumon $\frac{a}{2}$, az eredmény,
$$E_{\mathrm{EM}} = \sum_{\vec{n},s} E_{\vec{n},s}\ ,$$
ahol egy módus energiája
$$E_{\vec{n},s} = \varepsilon_0\,\tilde{q}_{\vec{n}}^{s}\left(0\right)^2$$
és bevezettük a
$$\tilde{q}_{\vec{n}}^{s}\left(0\right) = \frac{2q_{\vec{n}}^{s}\left(0\right)}{a}$$
amplitúdókat, nehogy azt higgyük, hogy a módusok energiája arányos az üreg térfogatával. Mint mindjárt látni fogjuk, az adott frekvencia tartományba eső módusok száma lesz arányos a térfogattal, biztosítva, hogy az energia extenzív (a térfogattal arányos) termodinamikai mennyiség.

2.3. A hőmérsékleti sugárzás energiasűrűsége

Feladatunk, hogy a $[\nu, \nu + d\nu]$ intervallumban kiszámítsuk az EM tér átlagos energiáját adott T hőmérsékleten. Mivel a teljes energia a módusok energiáinak összege, ki kell számítanunk ebbe a frekvencia intervallumba eső módusok számát. Bevezetve az

$$R^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \left(\frac{2a\nu}{c}\right)^2 \to R = \frac{2a\nu}{c}$$

jelölést, egy adott ν frekvenciánál kisebb frekvenciájú módusok száma:

$$N(\nu) = 2\frac{1}{8}\left(\frac{4\pi}{3}R^3\right) = \frac{8\pi V}{3c^3}\nu^3$$

ahol $V = a^3$ az üreg térfogata, a 2-es faktorral a két transzverzális módust vesszük figyelembe, az $\frac{1}{8}$ faktor pedig a gömb térfogatának nyolcadrésze miatt van, mivel n_x, n_y és n_z nemnegatív számok.

A $[\nu, \nu + d\nu]$ frekvencia intervallumba eső módusok száma:

$$dN(\nu) = \frac{dN(\nu)}{d\nu}d\nu = \frac{8\pi V}{c^3}\nu^2 d\nu\,.$$

A következőkben az egy módusra jutó $\overline{\varepsilon}$ termikus átlagenergiát határozzuk meg. Az üreg elektromágneses tere hőmérsékleti egyensúlyban van a környezetével (hőtartály), ami azt jelenti, hogy az üreg falán keresztül véletlenszerű energiaátadás történhet az EM tér és környezet között, azaz az EM tér energiája fluktuál, de átlagértéke jól meghatározott és csupán a rendszer és a környezet közös (egyensúlyi) T hőmérsékletétől, valamint a rendszer térfogatától függ. Ez utóbbit jól látjuk abból, hogy a módusok száma arányos a térfogattal. A statisztikus fizika szerint, ilyen esetben (kanonikus sokaság) a rendszer egy elemi vagy mikroállapotának (μ) valószínűsége

$$P_\mu = \frac{e^{-\beta\varepsilon_\mu}}{\sum_\mu e^{-\beta\varepsilon_\mu}}$$

ahol $\beta = 1/k_\mathrm{B}T$, k_B a Boltzmann-állandó és ε_μ a rendszer energiája a μ mikroállapotban. A klasszikus statisztikus fizikában a (q, p) általánosított koordinátákkal jellemzett rendszer mikroállapotának a fázistér $dqdp$ térfogatelemét tekintjük, melynek térfogata a h Planck-állandó. (Ez utóbbi választás, mely mögött a kvantummechanika határozatlansági relációja áll, most nem igazán lényeges.) A klasszikus elméletben tehát a mikroállapotok valószínűségsűrűsége

$$w(q,p) = \frac{e^{-\beta H(q,p)}}{\int\int \frac{dqdp}{h}\, e^{-\beta H(q,p)}}$$

ahol az energiát nyilvánvalóan a fázistéren értelmezett Hamilton-függvénnyel 'helyettesítjük'. A rendszer átlagenergiája pedig

$$\bar{E} = \frac{\int\int \frac{dqdp}{h} H(q,p)\, e^{-\beta H(q,p)}}{\int\int \frac{dqdp}{h}\, e^{-\beta H(q,p)}} = -\frac{d}{d\beta}\ln\left(\int\int \frac{dqdp}{h}\, e^{-\beta H(q,p)}\right)\,.$$

Az EM tér módusainak Hamilton-függvényét a

$$E = \frac{\varepsilon_0}{2}q_e^2 + \frac{1}{2\mu_0}q_m^2$$

energia kifejezésből származtatjuk, ahol a q_e és q_m függvényeket az elektromos tér $q^s_{\vec{n}}(t)$ és a mágneses indukció $-\frac{1}{c}q^s_{\vec{n}}(t)$ amplitúdói. Azonosítsuk a p általánosított impulzust a $q_m = -\frac{1}{c}q^s_{\vec{n}}(t)$ amplitúdóval és a q általánosított impulzust a $\frac{c\varepsilon_0}{\omega}q_e = \frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}}q^s_{\vec{n}}(t)$ függvénnyel! Ekkor a Hamilton-függvény

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2\mu_0} + \frac{\varepsilon_0}{2}\frac{\omega^2}{\varepsilon_0^2 c^2}q^2 = \frac{p^2}{2\mu_0} + \frac{1}{2}\mu_0\omega^2 q^2 .$$

A Hamilton mozgásegyenletek felhasználásával,

$$\begin{aligned}\dot{p} &= -\frac{\partial H(q,p)}{\partial q} = -\mu_0\omega^2 q \\ \dot{q} &= \frac{\partial H(q,p)}{\partial p} = \frac{1}{\mu_0}p ,\end{aligned}$$

megkapjuk az amplitúdók Maxwell-egyenletekből levezetett differenciálegyenletét,

$$\ddot{q} = \frac{\omega^2}{\varepsilon_0}\dot{p} = -\omega^2 q \to \ddot{q} + \omega^2 q = 0$$

és ugyanígy

$$\ddot{p} + \omega^2 q = 0 .$$

A megoldások a fázistér koordinátáira,

$$\begin{aligned}q(t) &= q(0)\sin(\omega t + \varphi) \\ p(t) &= p(0)\cos(\omega t + \varphi)\end{aligned}$$

ahol

$$p(0) = -\mu_0\omega\, q(0) ,$$

ami konzisztens a fázistér koordináták definícióival,

$$\begin{aligned}p(0) &= -\frac{1}{c}q^s_{\vec{n}}(0) \\ q(0) &= \frac{c\varepsilon_0}{\omega}q^s_{\vec{n}}(0)\end{aligned}$$

$$\Downarrow$$

$$p(0) = -\frac{1}{c}q^s_{\vec{n}}(0) = -c\mu_0\varepsilon_0 q^s_{\vec{n}}(0) = -\mu_0\omega\frac{c\varepsilon_0}{\omega}q^s_{\vec{n}}(0) = -\mu_0\omega\, q(0) .$$

Egy módus energiája a korábbiakhoz hasonlóan:

$$E = \varepsilon_0 q(0)^2 .$$

Most már ki tudjuk számítani a módus átlagenergiáját:

$$\begin{aligned}\int\int\frac{dqdp}{h}e^{-\beta H(q,p)} &= \frac{1}{h}\left[\int_{-\infty}^{\infty}dq\exp\left(-\frac{\beta\varepsilon_0}{2}q^2\right)\right]\left[\int_{-\infty}^{\infty}dp\,\exp\left(-\frac{\beta\omega^2}{2\varepsilon_0}p^2\right)\right] \\ &= \frac{1}{h}\sqrt{\frac{2}{\beta\varepsilon_0}}\sqrt{\frac{2\varepsilon_0}{\beta\omega^2}}\left(\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-x^2}\right)^2 = \frac{2\pi}{\beta h\omega} = \frac{1}{\beta h\nu} ,\end{aligned}$$

ahonnan

$$\bar{\varepsilon} = -\frac{d}{d\beta}\ln\frac{1}{\beta h\nu} = \frac{d}{d\beta}\ln\beta = \frac{1}{\beta} = k_{\mathrm{B}}T .$$

Ez a híres ekvipartíció-tétel (legalábbis lineáris oszcillátorra).

A $[\nu, \nu + d\nu]$ frekvencia intervallumba eső módusok átlagos energiája T hőmérsékleten:

$$dU(\nu, T) = \frac{8\pi V k_\mathrm{B} T}{c^3} \nu^2 d\nu$$

illetve az egységnyi térfogatra jutó átlagos energiasűrűség:

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi k_\mathrm{B} T}{c^3} \nu^2$$

Ez a *Rayleigh-Jeans sugárzási törvény*, ami nagy frekvencián az ultraibolya katasztrófához vezet.

A gond az, hogy a nagy frekvenciájú módusok akkora átlagos energiával rendelkeznek, mint az alacsony frekvenciás módusok. Matematikailag a folytonos integrálban megjelenő $1/\beta$ szorzófaktor eredményezi az átlagenergiában a $k_\mathrm{B}T$ járulékot. Ennek kiküszöbölésére fel kell tennünk, hogy minden módus csak egy ε_0 energia egészszámú többszörösét veheti fel. A statisztikus fizikai tárgyalásban ez azt jelenti, hogy a módus (lineáris harmonikus oszcillátor) mikroállapotait egyértelműen jellemzi egy n természetes szám és a módus energiája ebben a mikroállapotban $\varepsilon_n = n\varepsilon_0$ $(n \in \mathbb{N}_0)$. Számítsuk ki a termikus átlagenergiát ezzel a feltételezéssel:

$$\begin{aligned}\bar{\varepsilon} &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\varepsilon_0 e^{-\beta n \varepsilon_0}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n \varepsilon_0}} = -\frac{d}{d\beta} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n \varepsilon_0} = -\frac{d}{d\beta} \ln \frac{1}{1 - e^{-\beta \varepsilon_0}} \\ &= \frac{d}{d\beta} \ln\left(1 - e^{-\beta\varepsilon_0}\right) = \frac{\varepsilon_0 e^{-\beta\varepsilon_0}}{1 - e^{-\beta\varepsilon_0}} = \frac{\varepsilon_0}{e^{\beta\varepsilon_0} - 1} \,.\end{aligned}$$

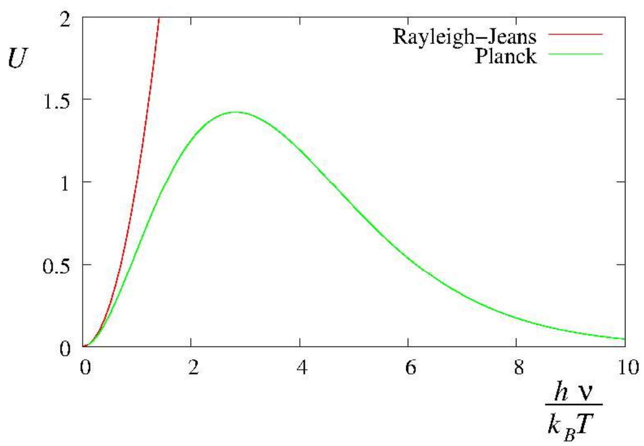
Nyilvánvaló, hogy

$$\bar{\varepsilon} \to \begin{cases} \frac{1}{\beta} & \text{ha} \quad \varepsilon_0 \to 0 \\ \varepsilon_0 e^{-\beta\varepsilon_0} & \text{ha} \quad \varepsilon_0 \to \infty \end{cases}$$

Ha tehát az ε_0 arányos a frekvenciával, $\varepsilon_0 \sim \nu$, alacsony frekvencián visszakapjuk a Rayleigh-Jeans sugárzási törvényt, magas frekvenciákon pedig az energiasűrűség exponenciálisan csökken.

Max Planck (1900): egy ν frekvenciájú oszcillátor energiája csak $h\nu$ egészszámú többszöröse lehet, ahol $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ J·s a Planck-állandó. A sugárzási tér módusaira is alkalmazva Planck hipotézisét kapjuk a *Planck-féle sugárzási törvényt*:

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\beta h \nu} - 1} \,.$$



Hőmérsékleti sugárzás frekvencia spektruma. (Török János – Orosz László – Kertész János: Elméleti Fizika 2. jegyzet 7.1 ábra másolata)

3. A Schrödinger-egyenlet

3.1. Intuitív bevezetés

Szabadon mozgó részecskére síkhullám alakot feltételezünk a $\psi(\vec{r},t)$ valószínűségi amplitúdóra (vagy hullámfüggvényre), amint azt a diffrakciós kísérletek implikálják:

$$\psi(\vec{r},t) = A\exp\left(i\vec{k}\vec{r} - i\omega t\right) .$$

Az elektromágneses tér energiakvantumai mintájára a részecske energiájára is feltesszük, hogy

$$E = h\nu = \hbar\omega ,$$

ahol $\hbar = h/2\pi$. A hullámfüggvényt tehát a

$$\psi(\vec{r},t) = A\exp\left(i\vec{k}\vec{r} - i\frac{E}{\hbar}t\right)$$

alakban írjuk. Az idő szerinti deriválás után kapjuk, hogy

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{r},t) = E\psi(\vec{r},t) . \tag{1}$$

A klasszikus szabad részecske energiája

$$E = \frac{p^2}{2m} .$$

De Broglie hipotézise alapján a részecske $\vec{p}$ impulzusához

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$$

hullámszám vektor rendelhető, tehát

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} .$$

A hullámfüggvényre hattatva a $\Delta = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$ Laplace-operátort,

$$\Delta\psi(\vec{r},t) = -k^2\psi(\vec{r},t) ,$$

amiből

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t) = E\psi(\vec{r},t) \tag{2}$$

következik. A (1) és (2) egyenletek összevetéséből kapjuk a szabad részecske Schrödinger-egyenletét,

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t) . \tag{3}$$

Figyelembe véve, hogy a fenti egyenlet jobb oldala a részecske kinetikus energiájával kapcsolatos, ha a részecske klasszikus potenciális energiája $V(\vec{r},t)$, akkor a Schrödinger-egyenletet a következőképpen egészítjük ki:

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t) , \tag{4}$$

amit *időfüggő Schrödinger-egyenlet*nek nevezünk. A potenciális energia időfüggése arra utal, hogy nem-konzervatív rendszerek leírására is alkalmazható a Schrödinger-egyenlet, mint pl. az időfüggő EM-térrel kölcsönható részecske esetében.

3.2. Stacionárius Schrödinger-egyenlet

Tekintsük azt az esetet, amikor a potenciális energia nem függ az időtől (konzervatív rendszer):

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r},t)\ .$$

Ebben az esetben a hullámfüggvény felvehető szorzatalakban:

$$\psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})\,\Theta(t)\ ,$$

amit behelyettesítve a Schrödinger-egyenletbe kapjuk, hogy

$$i\hbar\psi(\vec{r})\,\dot{\Theta}(t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r})\right)\Theta(t)\ .$$

Az idő és a térváltozók függvényeit szeparálva,

$$i\hbar\frac{\dot{\Theta}(t)}{\Theta(t)} = \frac{1}{\psi(\vec{r})}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r})\right)$$

nyilvánvaló, hogy az egyenlet mindkét oldala egy E valós konstanssal egyenlő:

$$i\hbar\frac{\dot{\Theta}(t)}{\Theta(t)} = E \to \Theta(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

és

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})\ . \tag{5}$$

Az E konstanst a stacionárius állapotban lévő rendszer energiájával azonosítjuk. Erre megfelelő motiváció, hogy egy $\vec{p}$ impulzusú, síkhullámmal jellemzett szabad részecske esetén, $\psi(\vec{r}) = A\exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}\right)$, az (5) egyenlet megoldása visszaadja az $E = \frac{p^2}{2m}$ összefüggést, de a későbbiekben más indoklást is találunk.

Konzervatív rendszerek (időtől független potenciális energia) esetén a hullámfüggvényt tehát kereshetjük a

$$\psi(\vec{r},t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\psi(\vec{r})$$

alakban, ahol $\psi(\vec{r})$ az (5) *időfüggetlen Schrödinger-egyenlet* megoldása. Az (5) egyenletnek általában több megoldása van,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_\mu(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi_\mu(\vec{r}) = E_\mu\psi_\mu(\vec{r})\ ,$$

melyek számossága lehet megszámlálható vagy folytonos, ezért az időfüggő Schrödinger egyenlet linearitása miatt az általános megoldás

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_\mu c_\mu e^{-i\frac{E_\mu}{\hbar}t}\psi_\mu(\vec{r})$$

mint pl. egy hullámcsomag esetén (l. később). Ezt behelyettesítéssel könnyen beláthatjuk:

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{r},t) = \sum_\mu E_\mu c_\mu e^{-i\frac{E_\mu}{\hbar}t}\psi_\mu(\vec{r})$$

és

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r},t) &= \sum_\mu c_\mu e^{-i\frac{E_\mu}{\hbar}t}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_\mu(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi_\mu(\vec{r})\right)\\ &= \sum_\mu E_\mu c_\mu e^{-i\frac{E_\mu}{\hbar}t}\psi_\mu(\vec{r})\end{aligned}$$

ahol feltételeztük, hogy a ∂_t és $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})$ operációk bevihetők az összegzés mögé.

3.3. A hullámfüggvény tulajdonságai

1) Mivel a komplex értékű hulllámfüggvény abszolút értékének négyzete a részecske megtalálási valószínűségsűrűsége

$$\rho(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2 \underset{\text{stac.}}{=} |\psi(\vec{r})|^2 ,$$

mely fizikai szemléletünknek megfelelően folytonos (két tetszőlegesen közeli infinitezimálisan kicsiny tértartományban a megtalálási valószínűségek között folytonos átmenetet feltételezünk), a $\psi(\vec{r})$ hullámfüggvényt is *folytonos függvény*.

2) Előfordul majd olyan körülmény, amikor a hullámfüggvényt a térben egy zárt görbe mentén vizsgáljuk és ekkor kihasználjuk, hogy a valószínűségi amplitúdó a tér minden pontjában meghatározott értéket vesz fel. Némiképp redundáns módon úgy fogalmazunk, hogy a hullámfüggvény *egyértékű*.

3) A megtalálási valószínűségsűrűség térbeli integrálja véges, illetve egy részecskére vonatkozóan egy, ezért

$$\int d^3r \, |\psi(\vec{r},t)|^2 = 1 ,$$

staiconárius esetben pedig

$$\int d^3r \, |\psi(\vec{r})|^2 = 1 .$$

A hullámfüggvény tehát a négyzetesen integrálható $\mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ függvények terének eleme, $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$.

A későbbiekben szükségünk lesz arra, hogy a hullámfüggvény milyen gyorsan cseng le az $r \to \infty$ határesetben. Az egyszerűség kedvéért tételezzük fel, hogy valamely nagy R esetén az $r > R$ tartományban a hullámfüggvény csak az r radiális koordinátától függ. Ebben a tartományban a megtalálási valószínűség,

$$\int_{r>R} d^3r \, |\psi(\vec{r})|^2 = 4\pi \int_R^\infty |\psi(r)|^2 r^2 dr < 1 .$$

Nyilvánvaló, hogy a hullámfüggvény abszolútértékének legalább hatványszerűen kell lecsengenie, $|\psi(r)| \propto r^{-\alpha}$ $(\alpha > 0)$. Ennek felhasználásával,

$$\int_R^\infty r^{2-2\alpha} dr = \frac{1}{3-2\alpha} \left(\lim_{r\to\infty} r^{3-2\alpha} - R^{3-2\alpha} \right) < \infty$$

ami csak úgy teljesülhet, hogy $2\alpha > 3$, azaz $\alpha > \frac{3}{2}$. (Az állítás kicsit precízebben is megfogalmazható a hullámfüggvény gömbharmonikusok szerinti kifejtésével, $\psi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^{l} R_l^m(r) Y_l^m(\vartheta,\varphi)$, de a mi céljainkra a fenti eredmény is elegendő lesz.)

3.4. Ortogonalitás

Bizonyítjuk, hogy a stacionárius Schrödinger-egyenlet különböző energiához tartozó megoldásai ortogonálisak az $L^2(\mathbb{R}^3)$ függvénytéren. Vegyünk fel két ilyen megoldást

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_1(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi_1(\vec{r}) = E_1\psi_1(\vec{r})$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_2(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi_2(\vec{r}) = E_2\psi_2(\vec{r})$$

ahol E_1, E_2 valós értékűek és $E_1 \neq E_2$. Az első egyenletet $\psi_2^*(\vec{r})$-rel megszorozva, a második egyenletet komplex konjugálva, majd $\psi_1(\vec{r})$-rel beszorozva és az így nyert két egyenletet egymásból kivonva kapjuk, hogy

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi_2^*(\vec{r})\,\Delta\psi_1(\vec{r}) - \psi_1(\vec{r})\,\Delta\psi_2^*(\vec{r})\right] = (E_1 - E_2)\,\psi_2^*(\vec{r})\,\psi_1(\vec{r}) \tag{6}$$

ahol kihasználtuk, hogy a $V(\vec{r})$ potenciális energia valós értékű függvény. A baloldali kifejezésről belátjuk, hogy az egy teljes divergencia,

$$\vec{\nabla}\left(\psi_2^*(\vec{r})\,\vec{\nabla}\psi_1(\vec{r}) - \psi_1(\vec{r})\,\vec{\nabla}\psi_2^*(\vec{r})\right) = \underbrace{\vec{\nabla}\psi_2^*(\vec{r})\cdot\vec{\nabla}\psi_1(\vec{r}) - \vec{\nabla}\psi_1(\vec{r})\cdot\vec{\nabla}\psi_2^*(\vec{r})}_{=0}$$
$$+\,\psi_2^*(\vec{r})\,\Delta\psi_1(\vec{r}) - \psi_1(\vec{r})\,\Delta\psi_2^*(\vec{r})$$

így a (6) egyenlet baloldalát egy R sugarú gömbben kiintegrálva felhasználhatjuk a Gauss-tételt:

$$\int_{r<R} d^3r\,\left(\psi_2^*(\vec{r})\,\Delta\psi_1(\vec{r}) - \psi_1(\vec{r})\,\Delta\psi_2^*(\vec{r})\right) = \oint_{r=R} d^2s\,\left(\psi_2^*(\vec{r})\,\vec{\nabla}\psi_1(\vec{r}) - \psi_1(\vec{r})\,\vec{\nabla}\psi_2^*(\vec{r})\right)\,.$$

Ha ismételten feltételezzük, hogy a hullámfüggvények nagy R estén csak a radiális koordináták függvényei, kihasználhatjuk a korábban levezetett hatvány-lecsengést:

$$\psi_1(r) \propto r^{-\alpha_1}\,,\; \psi_2(r) \propto r^{-\alpha_2} \quad \left(\alpha_1, \alpha_2 > \frac{3}{2}\right)$$

$$\vec{\nabla}\psi_1(r) \propto \frac{\vec{r}}{r} r^{-\alpha_1-1}\,,\; \vec{\nabla}\psi_2(r) \propto \frac{\vec{r}}{r} r^{-\alpha_2-1}$$

így a fenti integrál R-függése a következőképpen becsülhető:

$$\oint_{r=R} d^2s\,\left(\psi_2^*(\vec{r})\,\vec{\nabla}\psi_1(\vec{r}) - \psi_1(\vec{r})\,\vec{\nabla}\psi_2^*(\vec{r})\right) \propto R^2 R^{-\alpha_1-\alpha_2-1} = R^{1-\alpha_1-\alpha_2}$$

Mivel $1 - \alpha_1 - \alpha_2 < -2$, $R \to \infty$ határesetben a fenti integrál zérushoz tart, amiből a (6) egyenlet jobboldalának térbeli integráljára az alábbi kifejezés adódik:

$$(E_1 - E_2)\int d^3r\,\psi_2^*(\vec{r})\,\psi_1(\vec{r}) = 0\,.$$

Mivel $E_1 \neq E_2$, ebből

$$\int d^3r\,\psi_2^*(\vec{r})\,\psi_1(\vec{r}) = 0$$

következik. A későbbiekben részletesen foglalkozunk azzal, hogy a fenti egyenlet baloldala éppen a két négyzetesen integrálható függvény skalárszorzata. Ha ez zérus, akkor a két függvényt ortogonálisnak nevezzük.

3.5. Ehrenfest tételek

A kvantummechanika és klasszikus mechanika kapcsolatát megalapozó tételek Paul Ehrenfest, német fizikus nevéhez fűződnek. Mivel a részecske helyét csak a $\rho(\vec{r}, t)$ megtalálási valószínűségsűrűséggel tudjuk leírni, a kvantummechanikában nincs értelme az $\vec{r}(t)$ pálya fogalmának. Ehelyett csak a részecske $\langle\vec{r}\rangle$ átlagos helyét tudjuk meghatározni (mérni):

$$\langle\vec{r}\rangle = \int d^3r\,\vec{r}\rho(\vec{r}, t) = \int d^3r\,\vec{r}\,|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \int d^3r\,\psi^*(\vec{r}, t)\;\vec{r}\,\psi(\vec{r}, t)\;.$$

Nyilvánvaló, hogy $\langle \vec{r} \rangle$ a hullámfüggvényen keresztül függ az időtől, ezért a részecske átlagos helyének időderiváltja,

$$\frac{d\langle \vec{r} \rangle}{dt} = \int d^3r\, \partial_t \psi^* (\vec{r},t)\ \vec{r}\, \psi(\vec{r},t) + \int d^3r\, \psi^*(\vec{r},t)\ \vec{r}\, \partial_t \psi(\vec{r},t)$$

amit az időfüggő Schrödinger alapján írhatunk tovább:

$$\begin{aligned}\frac{d\langle \vec{r} \rangle}{dt} &= -\frac{1}{i\hbar}\int d^3r \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^*(\vec{r},t)\ \vec{r}\,\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\,\psi^*(\vec{r},t)\,\vec{r}\,\psi(\vec{r},t)\right) \\ &+ \frac{1}{i\hbar}\int d^3r \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*(\vec{r},t)\ \vec{r}\,\Delta\psi(\vec{r},t)\ + V(\vec{r},t)\,\psi^*(\vec{r},t)\,\vec{r}\,\psi(\vec{r},t)\right) \\ &= -\frac{i\hbar}{2m}\int d^3r\,(\Delta\psi^*(\vec{r},t)\ \vec{r}\,\psi(\vec{r},t) - \psi^*(\vec{r},t)\ \vec{r}\,\Delta\psi(\vec{r},t))\ .\end{aligned}$$

Alakítsuk tovább az integrandust! A tárgyalást egy x_i helykoordinátára korlátozva:

$$\Delta(x_i\psi(\vec{r},t)) = \partial_i^2(x_i\psi(\vec{r},t)) + \sum_{j\neq i}\partial_j^2(x_i\psi(\vec{r},t))$$

$$\partial_i^2(x_i\psi(\vec{r},t)) = \partial_i(\psi(\vec{r},t) + x_i\partial_i\psi(\vec{r},t)) = 2\partial_i\psi(\vec{r},t) + x_i\partial_i^2\psi(\vec{r},t)$$

azaz

$$\Delta(x_i\psi(\vec{r},t)) = 2\partial_i\psi(\vec{r},t) + x_i\Delta\psi(\vec{r},t)$$

ezért

$$\begin{aligned}\frac{d\langle x_i \rangle}{dt} &= -\frac{i\hbar}{2m}\int d^3r\,(\Delta\psi^*(\vec{r},t)\ x_i\,\psi(\vec{r},t) - \psi^*(\vec{r},t)\ \Delta(x_i\psi(\vec{r},t))) \\ &- \frac{i\hbar}{2m}\int d^3r\,\psi^*(\vec{r},t)\,\partial_i\psi(\vec{r},t)\ .\end{aligned}$$

A jobboldal első tagjában az integrandus ismét teljes divergenciává alakítható:

$$\Delta\psi^*\,x_i\,\psi - \psi^*\,\Delta(x_i\psi) = \vec{\nabla}\left(\vec{\nabla}\psi^* x_i\,\psi - \psi^*\vec{\nabla}(x_i\psi)\right)$$

így egy R sugarú gömbre vett térfogati integrál a gömbfelületre vett integrállá írható át. A hullámfüggvény hatványszerű lecsengését feltételezve, az integrál az $R^{-2\alpha+2}$ hatványfüggvénnyel arányos. Mivel a kitevő kisebb, mint -1, az integrál $R\to\infty$ határesetben eltűnik. Végeredményben az

$$\frac{d\langle \vec{r} \rangle}{dt} = \frac{1}{m}\int d^3r\,\psi^*(\vec{r},t)\,\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t)$$

egyenletet kapjuk, amit a klasszikus mechanika

$$\frac{d\vec{r}(t)}{dt} = \frac{\vec{p}}{m} \tag{7}$$

összefüggésével szeretnénk kapcsolatba hozni. A fenti kifejezés jobboldalán szereplő integrált célszerű az impulzus (mérési) átlagával azonosítani,

$$\langle \vec{p} \rangle = \int d^3r\,\psi^*(\vec{r},t)\,\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t)\ .$$

Ezt a feltételezést motiválja az a tény, hogy a $\vec{p}$ impulzusú, síkhullámmal leírt részecskére:

$$\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r} - \frac{i}{\hbar}Et\right) = \vec{p}\,\psi(\vec{r},t)\ ,$$

így a $\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$ differenciáloperátor valóban az impulzussal kapcsolatos. A kvantummechanikai méréselméletben ezt részletesen tárgyalni fogjuk. Ehrenfest első tétele következésképpen az

$$\frac{d\left\langle\vec{r}\right\rangle}{dt}=\frac{\left\langle\vec{p}\right\rangle}{m} \tag{8}$$

alakban írható, ami a klasszikus mechanika (7) kifejezésének valószínűségi (mérési) átlagokkal kifejezett analogonja.

Újabb idő szerinti deriválással a

$$\begin{aligned}
\frac{d^2\left\langle\vec{r}\right\rangle}{dt^2} &= \frac{\hbar}{im}\int d^3r\,\left[\partial_t\psi^*\left(\vec{r},t\right)\vec{\nabla}\psi\left(\vec{r},t\right)+\psi^*\left(\vec{r},t\right)\vec{\nabla}\partial_t\psi\left(\vec{r},t\right)\right]\\
&= \frac{1}{m}\int d^3r\,\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^*\left(\vec{r},t\right)\vec{\nabla}\psi\left(\vec{r},t\right)+V\left(\vec{r},t\right)\psi^*\left(\vec{r},t\right)\vec{\nabla}\psi\left(\vec{r},t\right)\right.\\
&\qquad\left.+\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\left(\vec{r},t\right)\vec{\nabla}\left(\Delta\psi^*\left(\vec{r},t\right)\right)-\psi^*\left(\vec{r},t\right)\vec{\nabla}\left(V\left(\vec{r},t\right)\psi\left(\vec{r},t\right)\right)\right]\\
&= -\frac{\hbar^2}{2m^2}\int d^3r\,\left[\Delta\psi^*\left(\vec{r},t\right)\vec{\nabla}\psi\left(\vec{r},t\right)-\psi^*\left(\vec{r},t\right)\vec{\nabla}\left(\Delta\psi^*\left(\vec{r},t\right)\right)\right]\\
&\quad+\frac{1}{m}\int d^3r\,\psi^*\left(\vec{r},t\right)\left(-\vec{\nabla}V\left(\vec{r},t\right)\right)\psi\left(\vec{r},t\right)
\end{aligned}$$

egyenletet kapjuk. Mivel

$$\Delta\psi^*\partial_i\psi-\psi^*\partial_i\left(\Delta\psi\right)=\Delta\psi^*\partial_i\psi-\psi^*\Delta\left(\partial_i\psi\right)=\vec{\nabla}\left(\left(\vec{\nabla}\psi^*\right)\partial_i\psi-\psi^*\vec{\nabla}\left(\partial_i\psi\right)\right)$$

az első térfogati integrál felületi integrállá alakítható, mely a hullámfüggvény hatványszerű viselkedése esetén $R^{-2\alpha}$ $\left(\alpha>\frac{3}{2}\right)$ szerint cseng le, ezért $R\to\infty$ határesetben eltűnik. Így kapjuk a második Ehresfest tételt,

$$\frac{d^2\left\langle\vec{r}\right\rangle}{dt^2}=\frac{1}{m}\langle-\vec{\nabla}V\rangle\,, \tag{9}$$

ahol

$$\langle-\vec{\nabla}V\rangle=\int d^3r\,\psi^*\left(\vec{r},t\right)\left(-\vec{\nabla}V\left(\vec{r},t\right)\right)\psi\left(\vec{r},t\right)=\int d^3r\,\rho\left(\vec{r},t\right)\left(-\vec{\nabla}V\left(\vec{r},t\right)\right)$$

a potenciális energia negatív gradiensének, azaz (időfüggetlen potenciál esetében) az erőnek a valószínűségi átlaga. Ez nyilvánvalóan Newton II. törvényének a kvantummechanikai valószínűségi átlagokra vett általánosítása.

Milyen körülmények között kapjuk meg Newton II. törvényét a (9) Ehrenfest-tételből? Jelöljük a helyvektor átlag értékét a $\psi\left(\vec{r},t\right)$ állapotban $\vec{r}_c$-vel és fejtsük sorba a részecskére ható $\vec{F}(\vec{r})=-\vec{\nabla}V(\vec{r})$ erőt $\vec{r}_c$ körül:

$$F_i(\vec{r})=F_i(\vec{r}_c)+\left(x_j-x_{c,j}\right)F_{j,i}\left(\vec{r}_c\right)+\frac{1}{2}\left(x_j-x_{c,j}\right)\left(x_k-x_{c,k}\right)F_{jk,i}\left(\vec{r}_c\right)+\dots$$

ahol

$$F_{j,i}=\partial_jF_i\,,\;F_{jk,i}=\partial_j\partial_kF_i\,,\dots$$

és az ismétlődő indexekre az Einstein-féle összegzési konvenciót használjuk. Ekkor

$$\langle F_i\rangle\simeq F_i(\vec{r}_c)+\frac{1}{2}\left\langle\left(x_j-x_{c,j}\right)\left(x_k-x_{c,k}\right)\right\rangle F_{jk,i}\left(\vec{r}_c\right)+\dots$$

ahol

$$\langle (x_j - x_{c,j})(x_k - x_{c,k}) \rangle = \int d^3r \, \rho(\vec{r},t)(x_j - x_{c,j})(x_k - x_{c,k}) \; ,$$

a valószínűségsűrűség második centrális momentumai. Az $\vec{r}_c(t)$ pályát meghatározó

$$m \frac{d^2 x_{c,i}(t)}{dt^2} = F_i(\vec{r}_c)$$

Newton II. egyenlethez akkor jutunk, ha az erő másod- és magasabb rendű deriváltjait tartalmazó tagok elhanyagolhatók. Ez pl. egzaktul fennáll konstans erőtérre vagy a térváltozókban lineáris erőtörvényre, azaz harmonikus oszcillátorra. Amikor a másodrendű derivált nem zérus, akkor a Newton II. törvény alkalmazhatóságának feltétele,

$$\frac{\langle (x_j - x_{c,j})(x_k - x_{c,k}) \rangle F_{jk,i}(\vec{r}_c)}{F_i(\vec{r}_c)} \ll 1$$

ami akkor teljesül, ha a sűrűségfüggvény kiterjedését jellemző második momentumok ($j = k$ esetben a koordináták $(\Delta x_j)^2 = \langle (x_j - x_{c,j})^2 \rangle$ szórásnégyzetei) kicsik, azaz a hullámfüggvény lokalizált és az erő a térben lassan változik. Ez nyilván fennáll egy katódsugárcsőben gyorsan mozgó elektron esetében, de az atomokban kötött elektronokra nem.

3.6. Kontinuitási egyenlet

A megtalálási valószínűségsűrűség idő szerinti deriváltját

$$\partial_t \rho(\vec{r},t) = \partial_t \left(\psi^*(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t)\right) = \psi^*(\vec{r},t)\,\partial_t\psi(\vec{r},t) + \psi(\vec{r},t)\,\partial_t\psi^*(\vec{r},t)$$

az időfüggő Schrödinger-egyenlet segítségével tovább írható,

$$\begin{aligned}
\partial_t \rho(\vec{r},t) =& \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*(\vec{r},t)\,\Delta\psi(\vec{r},t) + \psi^*(\vec{r},t)\,V(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t)\right) \\
&- \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi(\vec{r},t)\,\Delta\psi^*(\vec{r},t) + \psi(\vec{r},t)\,V(\vec{r},t)\,\psi^*(\vec{r},t)\right) \\
=& -\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*(\vec{r},t)\,\Delta\psi(\vec{r},t) - \psi(\vec{r},t)\,\Delta\psi^*(\vec{r},t)\right) \\
=& -\frac{\hbar}{2mi}\vec{\nabla}\left(\psi^*(\vec{r},t)\,\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t) - \psi(\vec{r},t)\,\vec{\nabla}\psi^*(\vec{r},t)\right) \; .
\end{aligned}$$

Bevezetve a

$$\vec{j}(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*(\vec{r},t)\,\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t) - \psi(\vec{r},t)\,\vec{\nabla}\psi^*(\vec{r},t)\right)$$

*valószínűségi áramsűrűség*et, kapjuk a

$$\partial_t \rho(\vec{r},t) + \operatorname{div}\vec{j}(\vec{r},t) = 0$$

kontinuitási egyenletet. A kontinuitási egyenlet integrális alakja,

$$\frac{d}{dt}\int_V d^3r\,\rho(\vec{r},t) + \oint_{\partial V} d\vec{s}\,\vec{j}(\vec{r},t) = 0$$

ahol V egy véges térrészt jelöl és ∂V annak a (zárt) felülete. Az egyenlet jelentése, hogy egy adott térrészben a részecske megtalálási valószínűségének az időbeli változása a felületre vett valószínűségi áramfluxussal egyezik meg. A Schrödinger-egyenlet tehát nem tartalmaz részecskeforrást vagy nyelőt. Ezt fejezi ki az az összefüggés, amit akkor kapunk, ha a V térfogattal a teljes térhez tartunk,

$$\frac{d}{dt}\int d^3r\rho\left(\vec{r},t\right)=\frac{d}{dt}\int d^3r\left|\psi\left(\vec{r},t\right)\right|^2=0\,,$$

ugyanis a már szokásos gondolatmenet szerint a nagy R sugarú gömb felületére vett valószínűségi áramfluxus $R^{-2\alpha+1}$ hatványfüggvénnyel arányos, ami $\alpha>\frac{3}{2}$ miatt $R\to\infty$ határesetben eltűnik. Megállapíthatjuk tehát, hogy a hullámfüggvény normája az időben nem változik, azaz egy adott pillanatban létező részecske semmilyen más időpillanatban nem tűnik el.

Érdemes megjegyezni, hogy a $\psi\left(\vec{r},t\right)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi\left(\vec{r}\right)$ stacionárius állapotban sem a valószínűségsűrűség, sem az áramsűrűség nem függ az időtől és $\operatorname{div}\vec{j}\left(\vec{r}\right)=0$. Egy $Ae^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$ síkhullámmal leírt szabad részecske valószínűségi áramsűrűsége:

$$\begin{aligned}\vec{j}\left(\vec{r}\right)&=\frac{\hbar}{2mi}\left(A^*e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}\left(\vec{\nabla}Ae^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}\right)-Ae^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}\left(\vec{\nabla}A^*e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}\right)\right)\\&=\left|A\right|^2\frac{\hbar}{2mi}2\frac{i}{\hbar}\vec{p}=\left|A\right|^2\frac{\vec{p}}{m}=\rho\,\vec{v}\end{aligned}$$

ahol $\rho=\left|A\right|^2$ valószínűségsűrűség, $\vec{v}=\vec{p}/m$ a részecske sebessége. A fenti kifejezés analóg a kontinuum közegek tömegáram sűrűségével.

4. Egydimenziós szórás

4.1. Szabad mozgás, hullámcsomag

Az időfüggő Schrödinger-egyenlet

$$i\hbar\partial_t\psi\left(x,t\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi\left(x,t\right) \tag{10}$$

síkhullám megoldása

$$\psi_p\left(x,t\right)=A\left(p\right)e^{\frac{i}{\hbar}\left(px-E(p)t\right)}, \tag{11}$$

ahol

$$E\left(p\right)=\frac{p^2}{2m}. \tag{12}$$

A síkhullám állapotban az impulzus várhatóértéke (l.Ehrenfest-tételek):

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_p^*\left(x,t\right)\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi_p\left(x,t\right)dx=\left|A\left(p\right)\right|^2p=\rho_p\,p \tag{13}$$

ahol ρ_p a részecske megtalálási valószínűségsűrűsége, mely független az x koordinátától. Ez azt jelenti, hogy a részecske azonos valószínűséggel található meg a tér bármely pontjában. Nyilvánvaló, hogy síkhullám állapot nem normálható, ezért a szabad részecske leírására csak idealizált esetben használható.

Térben lokalizált (normálható) megoldást úgy kapunk, hogy a síkhullámokat összegzünk (integrálunk):

$$\psi\left(x,t\right)=\int_{-\infty}^{\infty}A\left(p\right)e^{\frac{i}{\hbar}\left(px-E(p)t\right)}dp \tag{14}$$

mely továbbra is megoldása az időfüggő Schrödinger-egyenletnek. Célszerű az amplitúdó impulzusfüggését Gauss-függvénynek választani:

$$A\left(p\right)=Ce^{-\left(p-p_0\right)^2d^2/\hbar^2}\qquad\left(C\in\mathbb{R}\right). \tag{15}$$

Ekkor a hullámfüggvény:

$$\psi\left(x,t\right)=C\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\left(p-p_0\right)^2d^2/\hbar^2}e^{\frac{i}{\hbar}\left(px-p^2t/2m\right)}dp, \tag{16}$$

amit a

$$\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-ax^2+2bx}=\sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{b^2/a}\qquad\left(a,b\in\mathbb{C},\mathrm{Re}\,a>0\right) \tag{17}$$

Gauss-integrál segítségével kiintegrálunk:

$$-\frac{\left(p-p_0\right)^2d^2}{\hbar^2}+\frac{ix}{\hbar}p-\frac{it}{2m\hbar}p^2=-ap^2+2bx-c \tag{18}$$

$$a\left(t\right)=\frac{d^2}{\hbar^2}+\frac{it}{2m\hbar}\qquad b\left(x\right)=\frac{p_0d^2}{\hbar^2}+\frac{ix}{2\hbar}\qquad c=\frac{p_0^2d^2}{\hbar^2} \tag{19}$$

$$\Downarrow$$

$$\psi\left(x,t\right)=C\sqrt{\frac{\pi}{a\left(t\right)}}e^{b(x)^2/a(t)-c}. \tag{20}$$

Számítsuk ki a hullámcsomag állapotban a megtalálási valószínűségsűrűséget:

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{C^2\pi}{|a(t)|} e^{2\,\mathrm{Re}\left[b(x)^2/a(t)\right]-2c} \tag{21}$$

$$\begin{aligned}
\frac{b(x)^2}{a(t)} &= \frac{\left(\frac{p_0 d^2}{\hbar^2}+\frac{ix}{2\hbar}\right)^2}{\frac{d^2}{\hbar^2}+\frac{it}{2m\hbar}} \underset{\boxed{\alpha=\frac{\hbar}{2md^2}}}{=} -\frac{1}{4d^2}\frac{\left(x-i\frac{2p_0d^2}{\hbar}\right)^2}{1+i\alpha t} \\
&= -\frac{1}{4d^2\left(1+\alpha^2t^2\right)}\left(x-i\frac{2p_0d^2}{\hbar}\right)^2(1-i\alpha t) \\
&= -\frac{1}{4d^2\left(1+\alpha^2t^2\right)}\left(x^2-\frac{4p_0^2d^4}{\hbar^2}-4i\frac{p_0d^2}{\hbar}x\right)(1-i\alpha t) \\
&= -\frac{1}{4d^2\left(1+\alpha^2t^2\right)}\left(x^2-\frac{4p_0^2d^4}{\hbar^2}-4i\frac{p_0d^2}{\hbar}x-4\frac{p_0d^2\alpha}{\hbar}xt-i\alpha t\left(x^2-\frac{4p_0^2d^4}{\hbar^2}\right)\right)
\end{aligned} \tag{22}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{aligned}
\mathrm{Re}\,\frac{b(x)^2}{a(t)} &= -\frac{1}{4d^2\left(1+\alpha^2t^2\right)}\left(x^2-\frac{4p_0d^2\alpha}{\hbar}xt-\frac{4p_0^2d^4}{\hbar^2}\right) \\
&= -\frac{1}{4d^2\left(1+\alpha^2t^2\right)}\left(x^2-\frac{2p_0}{m}xt-\frac{4p_0^2d^4}{\hbar^2}\right) \\
&= -\frac{1}{4d^2\left(1+\alpha^2t^2\right)}\left(\left(x-\frac{p_0}{m}t\right)^2-\frac{4p_0^2d^4}{\hbar^2}-\frac{p_0^2}{m^2}t^2\right) \\
&= -\frac{\left(x-\frac{p_0}{m}t\right)^2}{4d^2\left(1+\alpha^2t^2\right)}+\frac{p_0^2d^2}{\hbar^2}
\end{aligned} \tag{23}$$

$$\Downarrow$$

$$2\,\mathrm{Re}\,\frac{b(x)^2}{a(t)}-2c = -\frac{\left(x-\frac{p_0}{m}t\right)^2}{2d^2\left(1+\alpha^2t^2\right)} \tag{24}$$

azaz

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{C^2\pi\hbar^2}{d^2\sqrt{1+\alpha^2t^2}} e^{-(x-v_0t)^2/2d^2\left(1+\alpha^2t^2\right)} \tag{25}$$

ahol $v_0 = p_0/m$ a részecske csoportsebessége. A hullámcsomag 1-re normálható, amiből $C^2 = d\sqrt{2\pi}/\hbar^2$ adódik:

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{d\sqrt{2\pi\left(1+\alpha^2t^2\right)}} e^{-(x-v_0t)^2/2d^2\left(1+\alpha^2t^2\right)}. \tag{26}$$

Világos, hogy a hullámcsomag középpontja v_0 sebességgel egyenletes mozgást végez, $\Delta x = d\sqrt{1+\alpha^2t^2}$ kiterjedése viszont az idővel monoton nő, a hullámcsomag szétfolyik. Mivel $\alpha \sim \frac{1}{m}$, makroszkópikus testekre a szétfolyás jelensége nem észlelhető.

4.2. A szórásprobléma megoldása

Szórási kísérletek elméleti leírásában a hullámcsomag mozgását tanulmányozzuk valamely szóró potenciál (target) jelenlétében. A szórópotenciál kiterjedését végesnek (elegendően gyorsan lecsengőnek) választva, attól távol valóban a fent megismert hullámcsomag megoldást kapjuk, így a kérdés arra egyszerűsíthető, hogy az egyes síkhullámok amplitúdója milyen változást szenved a szórópotenciál hatására. Egydimenziós esetben a bejövő hullámcsomag középpontját az $x_0\,(t=0) \to -\infty$ közelítéssel vesszük fel, míg a továbbhaladó hullámcsomag középpontjára $x_0\,(t\to\infty) \to \infty$, de a kísérletekkel összhangban a Schrödinger egyenlet megoldása egy visszavert hullámcsomagot is eredményezhet, melyre $x_0\,(t\to\infty) \to -\infty$. Ezeket a hullámcsomagokat rendre a

$$\psi_b\,(x,t) = \int_0^\infty A\,(p)\,e^{\frac{i}{\hbar}(px-E(p)t)}dp \quad (x\to-\infty) \tag{27}$$

$$\psi_v\,(x,t) = \int_0^\infty B\,(p)\,e^{\frac{i}{\hbar}(-px-E(p)t)}dp \quad (x\to-\infty) \tag{28}$$

$$\psi_t\,(x,t) = \int_0^\infty C\,(p)\,e^{\frac{i}{\hbar}(px-E(p)t)}dp \quad (x\to\infty) \tag{29}$$

alakban vesszük fel, ahol az első és harmadik függvény balról jobbra haladó, a második függvény pedig egy jobbról balra haladó hullámcsomagot ír le. Vegyük észre, hogy az integrálás alsó határát zérusnak választottuk, így ezek a hullámfüggvények akkor írnak le a korábbihoz hasonló hullámcsomagokat, ha a p_0 csoportimpulzus' lényegesen nagyobb, mint a hullámcsomagok $\hbar/d$ kiterjedése az impulzustérben. Az időfüggő Schrödinger egyenlet minden egyes síkhullám komponensre egymástól függetlenül megoldható. Mivel a szórópotenciál időfüggetlen (konzervatív rendszer), adott $E = E\,(p)$ energia mellett a $B(p)$ és $C(p)$ amplitúdók meghatározásához elegendő a stacionárius Schrödinger-egyenletet megoldani.

4.3. Potenciálgát és alagúteffektus

Tekintsünk egy egydimenziós potenciált, mely a $[-a,0]$ intervallumon kívül zérus értéket vesz fel:

$$V\,(x) = \begin{cases} 0 & I: x\le -a \\ \neq 0 & II: -a < x \le 0 \\ 0 & III: x>0 \end{cases} . \tag{30}$$

Ha a balról bejövő anyagi síkhullám hullámszáma k és energiája, $E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$, az I és III tartományban a hullámfüggvényeket az alábbi módon vesszük fel,

$$\psi_I\,(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{31}$$

$$\psi_{III}\,(x) = Ce^{ikx}\,. \tag{32}$$

Az I tartományban a valószínűségi áramsűrűség,

$$j_I\,(x) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_I^*\,(x)\,\frac{d\psi_I\,(x)}{dx} - \psi_I\,(x)\,\frac{d\psi_I^*\,(x)}{dx}\right) = \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left(\psi_I^*\,(x)\,\frac{d\psi_I\,(x)}{dx}\right) \tag{33}$$

$$= |A|^2\,\frac{\hbar k}{m} - |B|^2\,\frac{\hbar k}{m} + \frac{\hbar}{m}\underbrace{\mathrm{Im}\left(iB^*Ae^{2ikx} - iA^*Be^{-2ikx}\right)}_{0} \tag{34}$$

két komponensre bontható,

$$j_I = j_b - j_v \tag{35}$$

ahol

$$j_b = |A|^2\,\frac{\hbar k}{m} \tag{36}$$

a beeső hullám áramsűrűsége,

$$j_v = |B|^2 \frac{\hbar k}{m} \tag{37}$$

pedig a visszavert hullám áramsűrűsége. A kettő hányadosa definiálja a *visszaverődési (reflexiós) együtthatót*,

$$R = \frac{j_v}{j_b} = \left|\frac{B}{A}\right|^2 . \tag{38}$$

A továbbhaladó hullám valószínűségi áramsűrűsége,

$$j_{III} = j_t = |C|^2 \frac{\hbar k}{m} \tag{39}$$

melyből az *áthaladási (transzmissziós) együtthatót* definiáljuk:

$$T = \frac{j_t}{j_b} = \left|\frac{C}{A}\right|^2 . \tag{40}$$

Ha kijelölünk egy olyan hasábot a térben, melyet az x irányra merőleges A felületű síklap valamely $x < -a$ pontból egy $x > 0$ pontba való eltolásával kapunk, akkor ezen hasábra a valószínűségi áramsűrűség fluxusa $A\,(j_I - j_{III})$, hiszen az áramsűrűség merőleges az A felületű alaplapokra és párhuzamos a hasáb palástjával. A megtalálási valószínűségsűrűség az időben állandó (stacionárius eset), ezért a kontinuitási egyenletből

$$j_I - j_{III} = 0 \tag{41}$$

azaz

$$j_b - j_v - j_t = 0 \tag{42}$$

következik. A reflexiós és transzmissziós együtthatók definíciója alapján tehát fennáll az

$$R + T = 1 \tag{43}$$

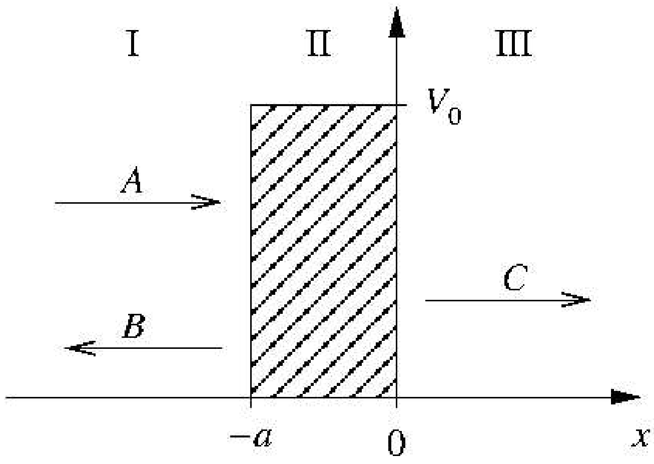
összefüggés, ami egyszerűen azt jelenti, hogy, ha egy részecske beszóródik a targetre, akkor az vagy visszaverődik vagy továbbhalad. Ez a rugalmas szórásra jellemző, hiszen rugalmatlan szórás esetén az adott energiával rendelkező részecskék száma a szórás során változhat.

Négyszög alakú potenciálgát esetében $V\,(x) = V_0$, ha $-a \leq x \leq 0$. Ekkor a II térrészben a hullámfüggvény általános alakja

$$\psi_{II}\,(x) = Fe^{i\alpha x} + Ge^{-i\alpha x} \tag{44}$$

ahol

$$\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} = E - V_0\,. \tag{45}$$



Egydimenziós potenciálgát. (Török János – Orosz László – Kertész János: Elméleti Fizika 2. jegyzet 16.1 ábra másolata)

A hullámfüggvény és deriváltja folytonos az $x = -a$ pontban, amiből a

$$\psi_I(-a) = \psi_{II}(-a) \Rightarrow Ae^{-ika} + Be^{ika} = Fe^{-i\alpha a} + Ge^{i\alpha a} \tag{46}$$
$$\psi_I'(-a) = \psi_{II}'(-a) \Rightarrow Ake^{-ika} - Bke^{ika} = F\alpha e^{-i\alpha a} - G\alpha e^{i\alpha a} \tag{47}$$

$$\Downarrow$$

$$A(\alpha + k)e^{-ika} + B(\alpha - k)e^{ika} = 2F\alpha e^{-i\alpha a} \tag{48}$$
$$A(\alpha - k)e^{-ika} + B(\alpha + k)e^{ika} = 2G\alpha e^{i\alpha a} \tag{49}$$

egyenleteket kapjuk. Ugyanígy az $x = 0$ pontban is illesztenünk kell a hullámfüggvényt és deriváltját:

$$\psi_{II}(0) = \psi_{III}(0) \Rightarrow F + G = C \tag{50}$$
$$\psi_{II}'(0) = \psi_{III}'(0) \Rightarrow (F - G)\alpha = kC \tag{51}$$

$$\Downarrow$$

$$2F\alpha = C(\alpha + k) \tag{52}$$
$$2G\alpha = C(\alpha - k)\ . \tag{53}$$

Az (48) és (52), valamint az (49) és (53) egyenletekből az F és G együtthatók eliminálhatók,

$$A(\alpha + k)e^{-ika} + B(\alpha - k)e^{ika} = C(\alpha + k)e^{-i\alpha a} \tag{54}$$
$$A(\alpha - k)e^{-ika} + B(\alpha + k)e^{ika} = C(\alpha - k)e^{i\alpha a} \tag{55}$$

majd a fenti két egyenletből a C együtthatót kifejezve

$$Ae^{i(\alpha-k)a} + B\frac{\alpha - k}{\alpha + k}e^{i(\alpha+k)a} = C \tag{56}$$
$$Ae^{-i(\alpha+k)a} + B\frac{\alpha + k}{\alpha - k}e^{-i(\alpha-k)a} = C \tag{57}$$

az

$$Ae^{i(\alpha-k)a}+B\frac{\alpha-k}{\alpha+k}e^{i(\alpha+k)a}=Ae^{-i(\alpha+k)a}+B\frac{\alpha+k}{\alpha-k}e^{-i(\alpha-k)a}$$

egyenletet nyerjük. Innen már meg tudjuk határozni a B/A hányadost:

$$A\left(e^{i(\alpha-k)a}-e^{-i(\alpha+k)a}\right)=B\left[\frac{\alpha+k}{\alpha-k}e^{-i(\alpha-k)a}-\frac{\alpha-k}{\alpha+k}e^{i(\alpha+k)a}\right] \tag{58}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{aligned}\frac{B}{A}&=\frac{e^{i(\alpha-k)a}-e^{-i(\alpha+k)a}}{\frac{\alpha+k}{\alpha-k}e^{-i(\alpha-k)a}-\frac{\alpha-k}{\alpha+k}e^{i(\alpha+k)a}}=\frac{e^{i\alpha a}-e^{-i\alpha a}}{\frac{\alpha+k}{\alpha-k}e^{-i\alpha a}-\frac{\alpha-k}{\alpha+k}e^{i\alpha a}}e^{-2ika}\\&=\frac{2i\sin\alpha a}{\frac{\alpha+k}{\alpha-k}e^{-i\alpha a}-\frac{\alpha-k}{\alpha+k}e^{i\alpha a}}e^{-2ika},\end{aligned} \tag{59}$$

és a reflexiós együtthatót,

$$\begin{aligned}R=\left|\frac{B}{A}\right|^2&=\frac{4\sin^2\alpha a}{\left(\frac{\alpha+k}{\alpha-k}e^{-i\alpha a}-\frac{\alpha-k}{\alpha+k}e^{i\alpha a}\right)\left(\frac{\alpha+k}{\alpha-k}e^{i\alpha a}-\frac{\alpha-k}{\alpha+k}e^{-i\alpha a}\right)}\\&=\frac{4\sin^2\alpha a}{\left(\frac{\alpha+k}{\alpha-k}\right)^2+\left(\frac{\alpha-k}{\alpha+k}\right)^2-2\cos 2\alpha a}\\&=\frac{4\sin^2\alpha a}{\left(\frac{\alpha+k}{\alpha-k}\right)^2+\left(\frac{\alpha-k}{\alpha+k}\right)^2-2+4\sin^2\alpha a}\\&=\left(1+\frac{\left(\frac{\alpha+k}{\alpha-k}\right)^2+\left(\frac{\alpha-k}{\alpha+k}\right)^2-2}{4\sin^2\alpha a}\right)^{-1}\\&=\left(1+\frac{\left(\frac{\alpha+k}{\alpha-k}-1\right)\left(\frac{\alpha+k}{\alpha-k}+1\right)+\left(\frac{\alpha-k}{\alpha+k}-1\right)\left(\frac{\alpha-k}{\alpha+k}+1\right)}{4\sin^2\alpha a}\right)^{-1}\\&=\left(1+\frac{4k\alpha\left(\frac{1}{(\alpha-k)^2}-\frac{1}{(\alpha+k)^2}\right)}{4\sin^2\alpha a}\right)^{-1}\\&=\left(1+\frac{4k^2\alpha^2}{\left(k^2-\alpha^2\right)^2\sin^2\alpha a}\right)^{-1}\end{aligned} \tag{60}$$

Az (56) és (59) egyenletekből a C/A arány kifejezhető,

$$\frac{C}{A}=\frac{4k\alpha}{(k+\alpha)^2-(k-\alpha)^2e^{2i\alpha a}}e^{i(\alpha-k)a} \tag{61}$$

így a transzmissziós együttható:

$$\begin{aligned}T &= \left|\frac{4k\alpha}{(k+\alpha)^2-(k-\alpha)^2 e^{2i\alpha a}}\right|^2\\&= \left|\frac{4k\alpha}{4k\alpha+(k-\alpha)^2\left(1-e^{2i\alpha a}\right)}\right|^2\\&= \left|1+\frac{(k-\alpha)^2\left(1-e^{2i\alpha a}\right)}{4k\alpha}\right|^{-2}\\&= \left(1+\frac{\left(k^2-\alpha^2\right)^2\sin^2\alpha a}{4k^2\alpha^2}\right)^{-1}.\end{aligned} \tag{62}$$

Könnyen belátható, hogy a reflexiós és transzmissziós együtthatók összege 1, ugyanis bevezetve a

$$t=\frac{4k^2\alpha^2}{\left(k^2-\alpha^2\right)^2\sin^2\alpha a}$$

jelölést és felhasználva a

$$\frac{1}{1+t}+\frac{1}{1+\frac{1}{t}}=1$$

azonosságot,

$$R+T=1 \tag{63}$$

adódik.

Fejezzük ki a transzmissziós együtthatót a V_0 és a potenciál paraméterekkel:

$$T=\left(1+\frac{V_0^2\sin^2\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-V_0\right)}a\right)}{4E\left(E-V_0\right)}\right)^{-1}, \tag{64}$$

és diszkutáljuk a kapott kifejezést. Először tekintsük az $E>V_0$ esetet.

1) Ha $\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-V_0\right)}a=n\pi$, azaz $E=V_0+\frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2m}$, akkor $T=1$, tehát a részecske 100%-os valószínűséggel áthalad a potenciálfalon (tökéletes áthaladás). Érdemes megállapítani, hogy ez pont akkor történik, amikor a potenciálgát szélessége $a=n\lambda/2$, ahol $\lambda=\frac{2\pi}{\alpha}$ a II térrészben (oda- vagy visszafelé) haladó síkhullám hullámhossza, mint egy húron kialakuló állóhullámok esetében.

2) Ha az energiával közelítünk a potenciálgát magasságához, $E\gtrsim V_0$ vagy nagyon keskeny a potenciálgát, $a\ll\lambda$, akkor a sin függvényt elsőrendben sorbafejtve a

$$\lim_{E\to V_0+0}T=\left(1+\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2}\right)^{-1}\leq 1 \tag{65}$$

kifejezést kapjuk. Innen látszik, hogy nagy tömegű részecske ($m\to\infty$) nagy valószínűséggel visszaverődik a potenciálgátról és ugyanez a helyzet 'erős potenciál', $V_0a^2\to\infty$, esetén is.

Megjegyezzük, hogy a fenti megállapítások vonzó potenciálvölgy, azaz $V_0<0$ esetén is fennállnak.

Ha az energia kisebb, mint a potenciálgát magassága ($E < V_0$), $\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}$ tisztán képzetes lesz. Használva a $\sin ix = i \sinh x$ azonosságot, a transzmissziós együtthatóra a

$$T = \left(1 + \frac{V_0^2 \sinh^2\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}a\right)}{4E(V_0 - E)}\right)^{-1}$$

kifejezést kapjuk.

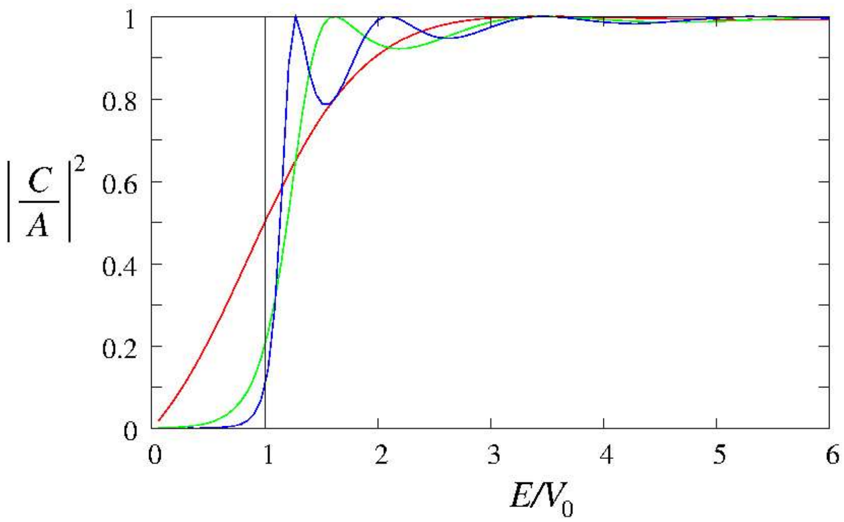
3) Mivel $0 < T < 1$, áthaladás akkor is van, ha az energia kisebb, mint a potenciálgát magassága. Ezt nevezzük *alagútefffektus*nak, mely nyilvánvalóan ellentmond a klasszikus mechanikának.

4) Magas potenciálgát és kicsi energia, vagy széles potenciálgát esetén ($\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}a \gg 1$) a transzmissziós együtthatóra a

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp\left(-\sqrt{\frac{8m}{\hbar^2}(V_0 - E)}a\right) \tag{66}$$

közelítést használhatjuk, amit úgy értelmezhetünk, hogy a hullámfüggvény exponenciális lecseng a II térrészben.

Az alagúteffektus számos fizikai jelenség magyarázatában szerepet játszik. Ezek egyike az atommagokból kiszabaduló pozitív töltésű α részecskék (2 proton + 2 neutron) intenzitásának értelmezése (α-bomlás), mely az atommag elektromos terén keresztüli alagutazással magyarázható. Ennek elméletét Georges Gamow dolgozta ki 1928-ban, ezért a (66) képletben szereplő exponenst (vagy annak a felét) Gamow-faktornak is szokták nevezni. Az alagúteffektus a hidegemisszió, a spontán ionizáció és molekuláris reakciók leírásában is fontos szerepet játszik.



Potenciálgát transzmissziós együtthatója $mV_0a^2/\hbar^2 = 4$ (piros), 8 (zöld), 12 (kék) esetén. (Török János – Orosz László – Kertész János: Elméleti Fizika 2. jegyzet 16.2 ábra másolata)

5. A lineáris harmonikus oszcillátor: megoldás Sommerfeld-féle polinom-módszerrel

Az egydimenziós harmonikus oszcillátor potenciálja

$$V(x) = \frac{1}{2}Dx^2 \ , \tag{67}$$

ahol D az erőállandó (direkciós erő). A *klasszikus mechanika* alapján, a fenti potenciálban egy m tömegű részecske $\omega = \sqrt{D/m}$ frekvenciájú harmonikus rezgést végez, így (67) a következő alakban is írható,

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2 \ , \tag{68}$$

azaz a Hamilton függvény

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \ . \tag{69}$$

A $t = 0$ időpontban zérus kitérést feltételezve, az ismert klasszikus megoldás

$$x(t) = A\sin(\omega t) \ , \tag{70}$$

ahol A a rezgés amplitúdója, mely az energiával az

$$E = \frac{m\omega^2}{2}A^2 \tag{71}$$

kapcsolatban áll. Nyilvánvaló, hogy az energia ill. az amplitúdó folytonosan változhatnak.

A *kvantummechanikai* tárgyalás szerint a

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\psi(x) = E\psi(x) \tag{72}$$

időfüggetlen Schrödinger-egyenletet kell megoldani.

Bevezetve az

$$q = \frac{x}{x_0} \quad \to \quad \frac{d^2}{dx^2} = \frac{1}{x_0^2}\frac{d^2}{dq^2} \ ,$$

változó transzformációt, a Schrödinger-egyenletet

$$-\frac{\hbar^2}{2mx_0^2}\frac{d^2\psi(q)}{dq^2} + \frac{m\omega^2x_0^2}{2}q^2\psi(q) = E\psi(q) \ , \tag{73}$$

alakra hozhatjuk. Célszerű az x_0 paramétert úgy megválasztani, hogy a fenti egyenlet baloldalán a $\frac{d^2}{dq^2}$ és a q^2 tagok együtthatói, az előjeltől eltekintve, megegyezzenek, azaz,

$$\frac{\hbar^2}{2mx_0^2} = \frac{m\omega^2x_0^2}{2} \quad \longrightarrow \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \ . \tag{74}$$

Ekkor a Schrödinger-egyenlet

$$\frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{d^2\psi(q)}{dq^2} + q^2\psi(q)\right) = E\psi(q) \ , \tag{75}$$

illetve a

$$-\frac{d^2\psi(q)}{dq^2} + q^2\psi(q) = \eta\psi(q) \ , \tag{76}$$

formában írhatjuk, ahol

$$\eta = \frac{2E}{\hbar\omega} \tag{77}$$

az energia helyett bevezetett dimenziótlan változó.

Írjuk át a (76) egyenletet,

$$\frac{d^2\psi\left(q\right)}{dq^2} + \left(\eta - q^2\right)\psi(q) = 0\,, \tag{78}$$

melynek először a $q \to \pm\infty$ határesetben vett, ún. aszimptotikus megoldását keressük,

$$\frac{d^2\psi_a\left(q\right)}{dq^2} - q^2\psi_a(q) = 0\,. \tag{79}$$

Felhasználva, hogy

$$\begin{aligned}\left(\frac{d}{dq} - q\right)\left(\frac{d}{dq} + q\right) &= \frac{d^2}{dq^2} + \frac{d}{dq}q - q\frac{d}{dq} - q^2 \\ &= \frac{d^2}{dq^2} - q^2 + 1 \underset{q\to\pm\infty}{\longrightarrow} \frac{d^2}{dq^2} - q^2\,,\end{aligned}$$

belátható, hogy a

$$\left(\frac{d}{dq} + q\right)\psi_a(q) = 0 \qquad \longrightarrow \qquad \psi_a(q) = e^{-q^2/2} \tag{80}$$

a keresett reguláris aszimptotikus megoldás.

A következő lépésben az általános megoldást az aszimptotikus megoldás és egy ismeretlen függvény szorzataként keressük:

$$\psi\left(q\right) = u\left(q\right)\psi_a(q) = u\left(q\right)e^{-q^2/2}\,. \tag{81}$$

Ezt behelyettesítjük a (78) egyenletbe,

$$\frac{d^2\left(u\left(q\right)e^{-q^2/2}\right)}{dq^2} + \left(\eta - q^2\right)u\left(q\right)e^{-q^2/2} = 0\,. \tag{82}$$

Elvégezve a megfelelő műveleteket,

$$\frac{d\left(u\left(q\right)e^{-q^2/2}\right)}{dq} = u'(q)e^{-q^2/2} - qu(q)e^{-q^2/2} \tag{83}$$

$$\frac{d^2\left(u\left(q\right)e^{-q^2/2}\right)}{dq^2} = u''(q)e^{-q^2/2} - 2qu'(q)e^{-q^2/2} + (q^2-1)u(q)e^{-q^2/2}\,, \tag{84}$$

az

$$u''(q) - 2qu'(q) + (\eta - 1)u(q) = 0 \tag{85}$$

egyenletet nyerjük. A továbbiakban feltételezzük, hogy az u függvényre érvényes a folytonos függvénykalkulus:

$$u\left(q\right) = \sum_{r=0}^{\infty} c_r q^r\,, \tag{86}$$

$$u'\left(q\right) = \sum_{r=1}^{\infty} r c_r q^{r-1} \qquad \longrightarrow \qquad 2qu'\left(q\right) = \sum_{r=0}^{\infty} 2r c_r q^r\,, \tag{87}$$

$$u''\left(q\right) = \sum_{r=2}^{\infty} r\left(r-1\right)c_r q^{r-2} = \sum_{r=0}^{\infty}\left(r+1\right)\left(r+2\right)c_{r+2}q^r\,. \tag{88}$$

A fenti kifejezéseket visszahelyettesítve a (85) egyenletbe a

$$\sum_{r=0}^{\infty}\left\{(r+1)(r+2)\,c_{r+2}-2rc_r+(\eta-1)c_r\right\}q^r=0 \tag{89}$$

egyenletet kapjuk, melyből a

$$c_{r+2}=\frac{2r+1-\eta}{(r+1)(r+2)}c_r \tag{90}$$

rekurziós összefüggés adódik ($r=0,1,2,\ldots$). Vegyük észre, hogy az u függvény hatványsorában az r-ik tag együthatója az $r+2$-ik tag együtthatóját határozza meg. Másrészt $r\to\infty$ határesetben, pontosabban $r\gg\frac{|\eta-1|}{2}$ esetén a rekurziós összefüggés közelíthető a

$$c_{r+2}\sim\frac{2}{r}c_r \tag{91}$$

kifejezéssel, mely az e^{q^2} függvény hatványegyütthatóira jellemző rekurziós reláció:

$$e^{q^2}=\sum_{r=0}^{\infty}\frac{q^{2r}}{r!}=\sum_{r=0,2,\ldots}\frac{q^r}{(r/2)!}\quad\longrightarrow\quad c_{r+2}=\frac{2}{r+2}c_r\underset{r\to\infty}{\longrightarrow}\frac{2}{r}c_r\,.$$

Könnyen belátható, hogy az $u\,(q)$ függvény tetszőleges pontossággal közelíti az $f_n\,(q)+Ce^{q^2}$ függvényt, ahol $f_n\,(q)$ n-edfokú polinom, C állandó és az n fokszám a kívánt pontossághoz állítható. Ez viszont azt jelenti, hogy a $\psi\,(q)=u\,(q)\,e^{-q^2/2}$ megoldás aszimptotikusan $e^{q^2/2}$ szerint divergál, tehát általános esetben ψ *nemreguláris* függvény. Ezt csak úgy tudjuk elkerülni, hogy a (90) rekurziós összefüggést valamely $r=n$ indexnél megállítjuk, azaz

$$\eta=2n+1\quad(n=0,1,2,\ldots) \tag{92}$$

választással biztosítjuk, hogy

$$c_n\neq0\;,\;c_{n+2}=c_{n+4}=\ldots=0\,. \tag{93}$$

Ha n páros, akkor a páratlan indexű együtthatók mind különböznek zérustól, ha $c_1\neq0$. Ekkor viszont a fentiek miatt u (és ψ) nemreguláris függvény lesz. Ebből következik, hogy páros n-re a megoldás csak páros függvény lehet. Ugyanezzel a gondolatmenettel belátható, hogy páratlan n-re a megoldás páratlan függvény.

A η paraméter definíciójából következik, hogy a lehetséges energiaértékek

$$\boxed{E_n=\hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right)\quad(n=0,1,2,\ldots)} \tag{94}$$

A megfelelő hullámfüggvényeket

$$\boxed{\psi_n\,(x)=N_n\,H_n\,(x/x_0)\;e^{-x^2/2x_0^2}} \tag{95}$$

alakban írjuk, ahol $H_n(q)$ az ún. Hermite-polinomokat jelöli:

$$\begin{array}{cc} n & H_n(q) \\ & \\ 0 & 1 \\ 1 & 2q \\ 2 & 4q^2-2 \\ 3 & 8q^3-12q \\ \vdots & \vdots \end{array}\,.$$

Ellenőrizzük a rekurziós relációt:

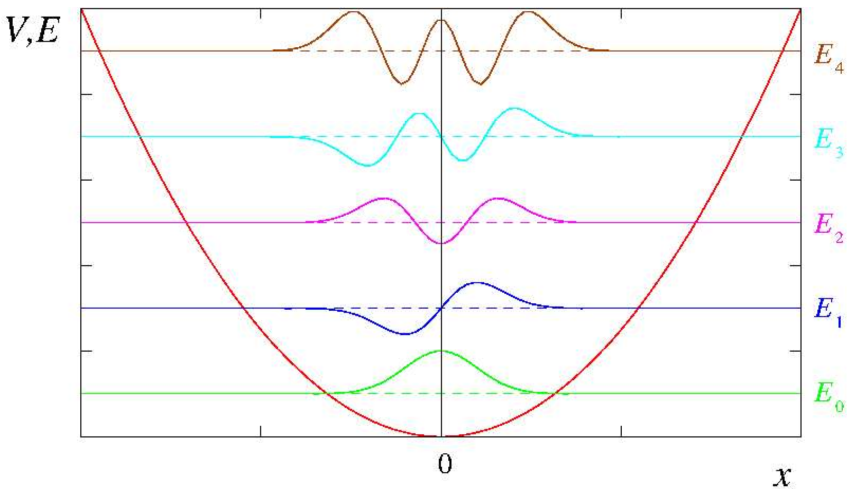
$$n = 2 \; : \; \eta = 5 \; , \; c_0 = -2 \; , \; c_2 = -2 \, \frac{1-5}{1 \cdot 2} = 4$$
$$n = 3 \; : \; \eta = 7 \; , \; c_1 = -12 \; , \; c_3 = -12 \, \frac{3-7}{2 \cdot 3} = 8 \quad .$$

A Hermite-polinomok ortogonalitási relációjából,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq \, e^{-q^2} \, H_n(q) \; H_m(q) = 2^n n! \sqrt{\pi} \, \delta_{nm} \, , \tag{96}$$

adódik, hogy

$$N_n = \left(2^n n! \sqrt{\pi} \, x_0\right)^{-1/2} \quad . \tag{97}$$



Az egydimenziós harmonikus oszcillátor energiaszintjeinek és hullámfüggvényeinek illusztrációja. (Török János – Orosz László – Kertész János: Elméleti Fizika 2. jegyzet 8.3 ábra másolata)

A zérusponti energia kísérleti bizonyítéka: A kétatomos molekulák rezgési színképe
A kétatomos molekulák infravörös tartományban észlelt egyenközű emissziós színképe jól magyarázható a harmonikus oszcillátor modellel. Valamely n'-ik állapotból az n-ik állapotba való ugrás esetén kibocsájtott foton energiája ugyanis

$$h\nu_f = E_{n'} - E_n = \hbar\omega(n' - n) \qquad n' > n \quad . \tag{98}$$

Az észlelt frekvenciaközökből nyilvánvalóan meghatározható a rezgés direkciós állandója:

$$\Delta\nu_f = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{D}{m}} \quad \longrightarrow \quad D = m\,(2\pi\,\Delta\nu_f)^2 \quad . \tag{99}$$

A $^1H\,^{35.5}C\ell$ (sósav) molekula esetén, $\Delta\nu_f = 8.65 \cdot 10^{13}\ 1/s$ ($\Delta E_f \simeq 0.3\ eV$) , $m_H = 1.673 \cdot 10^{-27}\ kg \ \rightarrow \ D \simeq 4.9\ N/cm$ (a redukált tömeg figyelembevételével $D \simeq 4.713\ N/cm$) adódik

Nagyobb energiás gerjesztéssel átmenetet indukálhatunk a sósav molekula elektronállapotai között is. Jelöljünk két ilyen állapotot A-val és B-vel. Ekkor a molekula teljes ('konfigurációs' és vibrációs) energiája

$$E(A, n) = E_A + \hbar\sqrt{\frac{D_A}{m}}\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{100}$$

ill.

$$E(B, n') = E_B + \hbar\sqrt{\frac{D_B}{m}}\left(n' + \frac{1}{2}\right) \tag{101}$$

tehát a visszaugrás során kisugárzott foton frekvenciája

$$\nu_{Bn'\to An} = \frac{E_B - E_A}{h} + \frac{1}{2\pi}\left[\sqrt{\frac{D_B}{m}}\left(n' + \frac{1}{2}\right) - \sqrt{\frac{D_A}{m}}\left(n + \frac{1}{2}\right)\right] \quad . \tag{102}$$

A ^1H atom helyett azonban előfordulhat a D (^2H) atom is, melynek kétszeres a tömege, viszont az elektronszerkezettől függő E_A, E_B, D_A és D_B állandók nem változnak. Az új redukált tömeget m^*-gal jelölve a színképben megjelennek a deutérium izotópra jellemző

$$\nu^*_{Bn'\to An} = \frac{E_B - E_A}{h} + \frac{1}{2\pi}\left[\sqrt{\frac{D_B}{m^*}}\left(n' + \frac{1}{2}\right) - \sqrt{\frac{D_A}{m^*}}\left(n + \frac{1}{2}\right)\right] \tag{103}$$

frekvenciák is. A fenti izotópeffektust vizsgáljuk meg az $n' = 0 \rightarrow n = 0$ (null-null) átmenetre:

$$\nu_{B0\to A0} - \nu^*_{B0\to A0} = \frac{1}{4\pi}\left(\frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{1}{\sqrt{m^*}}\right)\left(\sqrt{D_B} - \sqrt{D_A}\right) \neq 0 \quad . \tag{104}$$

Nyilvánvaló azonban, hogy amennyiben a harmonikus oszcillátornak nem lenne zérusponti energiája, a null-null átmenetre nem tapasztalnánk izotópeffektust. A fenti jelenséget észlelték pl. a $B - O$ molekula vibrációs spektrumában is ($^{10}B \ \rightarrow \ ^{11}B$ ill. $^{16}O \ \rightarrow \ ^{18}O$).

6. A kvantummechanika matematikai alapjai

6.1. A Hilbert-tér

Eddig azt tanultuk, hogy az fizikai rendszer (részecske) állapotát egy komplex értékű ψ állapotfüggvény jellemzi, mely négyzetesen integrálható, azaz $\psi \in L^2\left(\mathbb{R}^d\right)$, ahol $d \in \mathbb{N}$. Két hullámfüggvény tetszőleges lineárkombinációja is négyzetesen integrálható,

$$\int d^d r \ |c_1\psi_1(\vec{r}) + c_2\psi_2(\vec{r})|^2 = |c_1|^2 \int d^d r \ |\psi_1(\vec{r})|^2 + |c_2|^2 \int d^d r \ |\psi_2(\vec{r})|^2$$
$$+2\,\mathrm{Re}[c_1^* c_2 \int d^d r \, \psi_1^*(\vec{r})\, \psi_2(\vec{r})] < \infty \tag{105}$$

tehát

$$c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \in L^2\left(\mathbb{R}^d\right) , \tag{106}$$

azaz $L^2\left(\mathbb{R}^d\right)$ egy *vektortér* vagy *lineáris tér*. Az összeadásra és a komplex számmal való szorzásra vonatkozó alapvető tulajdonságok nyilvánvalóan teljesülnek.

Két függvény *skalárszorzat*a (belső szorzata) egy $L^2\left(\mathbb{R}^d\right) \times L^2\left(\mathbb{R}^d\right) \to \mathbb{C}$ leképezés,

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int d^d r \, \psi^*(\vec{r})\, \varphi(\vec{r}) \ , \tag{107}$$

melyre könnyen beláthatók az alábbi tulajdonságok:

$$\langle\psi|\varphi_1 + \varphi_2\rangle = \langle\psi|\varphi_1\rangle + \langle\psi|\varphi_2\rangle \tag{108}$$
$$\langle\psi|c\varphi\rangle = c\langle\psi|\varphi\rangle \quad (c \in \mathbb{C}) \tag{109}$$
$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^* \tag{110}$$

valamint

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0\,, \tag{111}$$

és

$$\langle\psi|\psi\rangle = 0 \Leftrightarrow \psi = 0 \in L^2\left(\mathbb{R}^d\right) . \tag{112}$$

A skalárszorzat két utóbbi tulajdonsága lehetővé teszi, hogy az $L^2\left(\mathbb{R}^d\right)$ elemeinek hosszát,

$$|\psi| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{113}$$

illetve távolságát,

$$d(\psi,\varphi) = |\psi - \varphi| = \sqrt{\langle\psi - \varphi|\psi - \varphi\rangle} \tag{114}$$

definiáljuk. A fizikai állapotokat leíró hullámfüggvényekre,

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int d^d r \, \psi^*(\vec{r})\, \psi(\vec{r}) = 1\,. \tag{115}$$

A skalárszorzat alapvető tulajdonságaiból további azonosságok vezethetők le:

$$\langle\varphi_1 + \varphi_2|\psi\rangle = \langle\varphi_1|\psi\rangle + \langle\varphi_1|\psi\rangle \tag{116}$$
$$\langle c\psi|\varphi\rangle = c^*\langle\psi|\varphi\rangle \quad (c \in \mathbb{C}) \tag{117}$$

$$\langle\psi|0\rangle = \langle\psi|\varphi - \varphi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle - \langle\psi|\varphi\rangle = 0\,. \tag{118}$$

Hasznos következmény a *Cauchy-Bunyakovszkij-Schwarz egyenlőtlenség*:

$$|\langle\psi|\varphi\rangle|^2 \leq \langle\psi|\psi\rangle\langle\varphi|\varphi\rangle\,. \tag{119}$$

Bizonyítás: Tetszőleges $\lambda \in \mathbb{C}$ számra

$$\langle\psi-\lambda\varphi|\psi-\lambda\varphi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle + |\lambda|^2\langle\varphi|\varphi\rangle - \lambda\langle\psi|\varphi\rangle - \lambda^*\langle\varphi|\psi\rangle \geq 0\,.$$

Legyen

$$\lambda = \frac{\langle\varphi|\psi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle}\,,$$

ekkor

$$\begin{aligned}&\langle\psi|\psi\rangle + \frac{\langle\varphi|\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle} - \frac{\langle\psi|\varphi\rangle\langle\varphi|\psi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle} - \frac{\langle\varphi|\psi\rangle\langle\varphi|\psi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle}\\ &= \langle\psi|\psi\rangle - \frac{\langle\varphi|\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle} \geq 0\,.\end{aligned}$$

amiből a CBS-egyenlőtlenség már következik. Ha $\varphi = k\psi \quad (k \neq 0)$, akkor nyilvánvalóan az egyenlőség áll fenn. Ha viszont $\varphi = k\psi + \chi$, ahol $\langle\psi|\chi\rangle = 0$, akkor

$$\begin{aligned}|\langle\psi|\varphi\rangle|^2 &= |k|^2\,\langle\psi|\psi\rangle^2\\ \langle\varphi|\varphi\rangle &= |k|^2\,\langle\psi|\psi\rangle + \langle\chi|\chi\rangle\end{aligned}$$

amiből

$$\langle\psi|\psi\rangle\langle\varphi|\varphi\rangle = |k|^2\,\langle\psi|\psi\rangle^2 + \langle\psi|\psi\rangle\langle\chi|\chi\rangle > |\langle\psi|\varphi\rangle|^2$$

következik, azaz az egyenlőtlenség áll fenn. Könnyen belátható a *háromszög egyenlőtlenség* is:

$$\begin{aligned}|\psi+\varphi|^2 &= \langle\psi|\psi\rangle^2 + \langle\varphi|\varphi\rangle^2 + \langle\psi|\varphi\rangle + \langle\varphi|\psi\rangle\\ &\leq \langle\psi|\psi\rangle^2 + \langle\varphi|\varphi\rangle^2 + 2|\langle\psi|\varphi\rangle|^2\\ &\leq \langle\psi|\psi\rangle^2 + \langle\varphi|\varphi\rangle^2 + 2\langle\psi|\psi\rangle\langle\varphi|\varphi\rangle\\ &= (\langle\psi|\psi\rangle + \langle\varphi|\varphi\rangle)^2\,,\end{aligned}$$

ahonnan

$$|\psi+\varphi| \leq |\psi| + |\varphi|\;. \tag{120}$$

A fentieket általánosítva, bármely V vektortéren a (108)-(112) tulajdonságokkal rendelkező $V \times V \to \mathbb{C}$ műveletet skalárszorzatnak nevezzük. Az N-komponensű komplex értékű vektorok terén, $V = \mathbb{C}^N$, a

$$\underline{a},\underline{b} \in V : \langle\underline{a}|\underline{b}\rangle \equiv \underline{a}^\dagger\underline{b} = \sum_{n=1}^{N} a_n^* b_n \in \mathbb{C} \tag{121}$$

művelet skalárszorzat és az $\underline{a}$ vektor normája

$$|\underline{a}| = \sqrt{\sum_{n=1}^{N} |a_n|^2}\,. \tag{122}$$

A V vektortéren a $\{v_n\}_{n=1,\ldots,N}$ vektorhalmazt lineárisan függetlennek nevezzük, ha

$$\sum_{n=1}^{N} c_n v_n = 0 \quad (c_n \in \mathbb{C}) \Leftrightarrow \forall c_n = 0. \tag{123}$$

Szemléletesen ez azt jelenti, hogy a v_n vektorok egyike sem áll elő a többi lineáris kombinációjaként. Ha viszont a vektortér valamely eleme felírható a v_n vektorok lineáris kombinációjaként, $v = \sum_{n=1}^{N} c_n v_n$, akkor a $\{c_n\}_{n=1,\dots,N}$ számsorozat egyértelműen meghatározott, ugyanis

$$v = \sum_{n=1}^{N} c_n v_n = \sum_{n=1}^{N} c'_n v_n \to \sum_{n=1}^{N} (c_n - c'_n)\, v_n = 0 \to c_n = c'_n \;\; (\forall n) \; . \tag{124}$$

A vektortér bázisa egy maximális számosságú $\{v_n\}$ lineárisan független vektorhalmaz, azaz $\forall v \in V$ a $\{v_n, v\}$ halmaz lineárisan összefüggő: $\exists\, c \neq 0$ és $\{c_n\}$, ahol legalább egy $c_n \neq 0$, hogy $cv + \sum_{n=1}^{N} c_n v_n = 0$, amiből következik, hogy a vektortér bármely eleme (egyértelműen) előáll a bázisvektorok lineáris kombinációjaként. A vektortér *dimenzió*jának nevezzük a bázis számosságát. A $\mathbb{C}^N$ vektortér dimenziója N, a $\mathbb{C}^\infty$ és $L^2\left(\mathbb{R}^d\right)$ megszámlálhatóan végtelen dimenziójú vektorterek.

Skalárszorzatos V vektortéren a $\{v_n\}_{n=1,\dots,N}$ páronként ortogonális vektorok lineárisan függetlenek:

$$\sum_{n=1}^{N} c_n v_n = 0 \to \langle v_i | \sum_{n=1}^{N} c_n v_n \rangle = \sum_{n=1}^{N} c_n \langle v_i | v_n \rangle = c_i \langle v_i | v_i \rangle = 0 \to c_i = 0 \;\; (\forall i) \; . \tag{125}$$

Könnyen belátható, hogy egy páronként ortonormált vektorokból álló $\{v_n\}$ halmaz számossága növelhető, ha létezik egy lineárisan független v vektor (Gram-Schmidt ortogonalizációs eljárás):

$$c_n \equiv \langle v | v_n \rangle \to v' \equiv v - \sum_{n=1}^{N} c_n v_n \to \langle v' | v_n \rangle = 0 \;\; (\forall n) \, . \tag{126}$$

Innen következik, hogy a V vektortéren létezik olyan bázis, melynek elemei páronként ortogonálisak, illetve ortonormáltak. Ezt szokás teljes ortonormált rendszernek (TONR) nevezni. Az $L^2(\mathbb{R})$ vektortéren a lineáris harmonikus $\{\psi_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ normált sajátfüggvényei TONR-t alkotnak.

*Hilbert-tér*nek nevezzük azt a $\mathcal{H}$ skalárszorzatos vektorteret, mely a Cauchy-sorozatok határértékeit is tartalmazza (a Cauchy-sorozatok konvergálnak $\mathcal{H}$-ban). Véges dimenziós skalárszorzatos vektortér nyilvánvalóan Hilbert-tér is. Legyen $\{v_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ TONR egy *megszámlálhatóan végtelen dimenziós* Hilbert-téren. Az

$$s_N = \sum_{n=1}^{N} c_n v_n \quad (N \in \mathbb{N}) \tag{127}$$

sorozat Cauchy-sorozat, ha tetszőleges $\varepsilon > 0$ esetén $\exists\, N_\varepsilon \in \mathbb{N}$, hogy $\forall N, M > N_\varepsilon$

$$|s_N - s_M| = |\sum_{n=N}^{M} c_n v_n| < \varepsilon \, . \tag{128}$$

Ebből következik, hogy

$$|\sum_{n=N}^{M} c_n v_n|^2 = \sum_{n,m=N}^{M} c_n c_m^* \langle v_n | v_m \rangle = \sum_{n=N}^{M} |c_n|^2 < \varepsilon' \; \left(= \varepsilon^2\right) \; . \tag{129}$$

Mivel

$$\sum_{n=N}^{M} |c_n|^2 = |\sum_{n=N}^{M} |c_n|^2| \, , \tag{130}$$

a $\sum_{n=1}^{N} |c_n|^2$ valós számsorozat is Cauchy-sorozat, tehát konvergens,

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 < \infty \,.$$

Így a végtelen számosságú bázis alterének azon vektorai, melyek egy Cauchy-sorozat határértékei,

$$v = \lim_{N\to\infty} s_N = \sum_{n=1}^{\infty} c_n v_n \tag{131}$$

valóban a Hilbert-tér elemei,

$$\langle v|v\rangle = \lim_{N,M\to\infty} \sum_{n,m=1}^{N} c_n^* c_m \langle v_n|v_m\rangle = \lim_{N\to\infty} \sum_{n=1}^{N} |c_n|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 < \infty \,. \tag{132}$$

Megjegyezzük, hogy a TONR által kifeszített altér sűrű a Hilbert-téren, tehát a Hilbert-térnek lehetnek elemei, melyek 'csak' tetszőleges pontossággal közelíthetők a (131) elemekkel, de ezen halmaz nullmértékű. Ezért a fizikai szakirodalomban a Hilbert-teret *teljes*nek nevezzük, arra utalva, hogy (lényegében) minden eleme (131) alakú. Az $L^2([a,b])$ tér teljességét Riesz Frigyes és Ernst Fischer egymástól függetlenül bizonyították be 1907-ben (Riesz-Fischer tétel).

A $\psi \in L^2\left(\mathbb{R}^d\right)$ hullámfüggvény tehát egyértelműen előáll a

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n \tag{133}$$

alakban, ahol $\{\varphi_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ TONR, $d = 1$ esetén pl. a harmonikus oszcillátor stacionárius állapotai. Ez azt jelenti, hogy a $\underline{c} \in \mathbb{C}^\infty$ számvektor egyértelműen meghatározza (reprezentálja) a hullámfüggvényt. Mivel

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 < \infty \tag{134}$$

$\underline{c} \in \ell^2$, mely a véges normájú végtelen dimenziós komplex értékű számvektorok Hilbert-tere. Így tehát az állapotot nem csak egy folytonos függvénnyel, hanem egy számvektorral is le tudjuk írni. A két leírásban az a közös, hogy a kvantummechanikai állapotot egy Hilbert-tér elemeivel azonosítjuk. Mivel az állapot egyikfajta ábrázolása sem kitüntetett, a kvantummechanika általános matematikai formalizmusa szerint csak annyit állítunk, hogy *a rendszer állapotai Hilbert-teret alkotnak.*

6.2. Lineáris operátorok

Az $\hat{O} : V \to V$ leképezéseket általában a V vektortéren ható operátoroknak nevezzük, azaz $v \in V \to \hat{O}v \in V$. A kvantummechanikában a szuperpozíció elve miatt lineáris operátorokkal foglalkozunk, azaz

$$\hat{O}\,(v_1 + v_2) = \hat{O}v_1 + \hat{O}v_2 \tag{135}$$

$$\hat{O}(c\,v) = c\,\hat{O}v \,. \tag{136}$$

Identitásnak nevezzük az $\hat{I}$ operátort, ha $\hat{I}v = v \quad (\forall v \in V)$. A vektortér nullelemét a lineáris operátorok a nullelemre képezik le:

$$\hat{O}\,0 = \hat{O}\,(v - v) = \hat{O}v - \hat{O}v = 0 \,. \tag{137}$$

Lineáris operátorok lineáris kombinációja,

$$\left(\lambda_1\hat{O}_1+\lambda_2\hat{O}_2\right)v\equiv\lambda_1\hat{O}_1v+\lambda_2\hat{O}_2v \tag{138}$$

is lineáris operátor. Belátható, hogy a lineáris téren ható lineáris operátorok is lineáris teret alkotnak.

Az $f:\mathbb{R}^d\to\mathbb{C}$ függvény egy *multiplikatív lineáris operátor*t definiál az $L^2\left(\mathbb{R}^d\right)$ téren: $\psi\in L^2\left(\mathbb{R}^d\right)$

$$\psi\to\hat{f}\,\psi:\left(\hat{f}\,\psi\right)(\vec{r})\equiv f(\vec{r})\,\psi(\vec{r})\ . \tag{139}$$

Ennek speciális esete az $\hat{x}_i$ *koordináta-operátor,*

$$\left(\hat{x}_i\,\psi\right)(\vec{r})\equiv x_i\psi(\vec{r})\ . \tag{140}$$

Az Ehrenfest-tételekből azt sejtjük, hogy az *impulzus*hoz a $\widehat{\vec{p}}=\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$ vagy a $\hat{p}_i=\frac{\hbar}{i}\partial_i$ lineáris operátorokat rendelhetjük,

$$\left(\hat{p}_i\psi\right)(\vec{r})=\frac{\hbar}{i}\partial_i\psi(\vec{r})\ . \tag{141}$$

Célszerű a *kinetikus energiá*hoz a

$$\hat{K}=\frac{\widehat{\vec{p}}^{\,2}}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \tag{142}$$

lineáris operátort rendelni, mely a Schrödinger-egyenletben is megjelenik.

Az operátorok szorzatát a fenti kifejezésben a következőképpen definiáltuk,

$$\left(\hat{O}_1\hat{O}_2\right)v=\hat{O}_1\left(\hat{O}_2v\right)\ . \tag{143}$$

Multiplikatív operátorok szorzata nyilvánvalóan kommutatív, de a $\hat{p}_i$ és $\hat{x}_j$ operátorok szorzata nem felcserélhető:

$$\begin{aligned}\left(\hat{p}_i\hat{x}_j\psi\right)(\vec{r})&=\frac{\hbar}{i}\partial_i\left(x_j\psi(\vec{r})\right)=\frac{\hbar}{i}\left(\partial_ix_j\right)\psi(\vec{r})+\frac{\hbar}{i}x_j\partial_i\psi(\vec{r})\\&=\frac{\hbar}{i}\delta_{ij}\psi(\vec{r})+\left(\hat{x}_j\hat{p}_i\psi\right)(\vec{r})\end{aligned} \tag{144}$$

azaz

$$\hat{p}_i\hat{x}_j=\hat{x}_j\hat{p}_i+\frac{\hbar}{i}\delta_{ij}\hat{I}\,. \tag{145}$$

Két operátor felcserélhetőségét jellemzi az operátorok *kommutátor*a,

$$\left[\hat{O}_1,\hat{O}_2\right]\equiv\hat{O}_1\hat{O}_2-\hat{O}_2\hat{O}_1\,. \tag{146}$$

Az impulzus és koordináta-operátorok felcserélési relációja,

$$\left[\hat{p}_i,\hat{x}_j\right]=\frac{\hbar}{i}\delta_{ij}\hat{I} \tag{147}$$

a kvantummechanika egyik alapvető összefüggése.

Az $\hat{O}$ operátor sajátértékének és sajátvektorának nevezzük azt a k komplex számot és v vektort, melyre

$$\hat{O}\,v=k\,v\,. \tag{148}$$

Az $\hat{O}$ operátor sajátértékeinek halmazát az operátor spektrumának nevezzük. Mint azt korábban láttuk a $\hat{p}_i$ operátor sajátfüggvényei a $\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = Ae^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$ síkhullámok

$$\hat{p}_i\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i}\partial_i(Ae^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}) = Ap_i e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} = p_i\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) \tag{149}$$

bár itt vigyáznunk kell, mert $\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) \notin L^2\left(\mathbb{R}^d\right)$ (l. az operátorok folytonos spektrumával foglalkozó fejezetet). Egy másik példa az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet, melyet átírhatunk a

$$(\hat{H}\psi)(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{150}$$

operátor sajátérték-egyenlet formába, ahol

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = \frac{\widehat{\vec{p}}^{\,2}}{2m} + \hat{V} \tag{151}$$

az ún. *Hamilton-operátor*.

6.3. Hermitikus operátorok

Legyen $\hat{O}$ egy $\mathcal{H}$ Hilbert-téren ható operátor, mely $\hat{O}^+$ *adjungált*ját a következőképpen definiáljuk. Az $\hat{O}^+$ operátor értelmezési tatománya (domén),

$$\mathcal{D}_{\hat{O}^+} = \left\{ u \in \mathcal{H} : \exists\, w \in \mathcal{H} \quad \langle u|\hat{O}v\rangle = \langle w|v\rangle \quad \forall\, v \in \mathcal{D}_{\hat{O}} \right\}. \tag{152}$$

Ekkor

$$w = \hat{O}^+ u\,. \tag{153}$$

Egyszerűbben ezt úgy írhatjuk, hogy $\forall\, v \in \mathcal{D}_{\hat{O}}$ és $\forall\, u \in \mathcal{D}_{\hat{O}^+}$,

$$\langle u|\hat{O}v\rangle = \langle \hat{O}^+ u|v\rangle\,. \tag{154}$$

Általában $\mathcal{D}_{\hat{O}} \neq \mathcal{D}_{\hat{O}^+}$.

A megfelelő értelmezési tartományon, operátorok lineárkombinációjának adjungáltja:

$$\begin{aligned}\langle u|(\lambda_1\hat{O}_1 + \lambda_2\hat{O}_2)v\rangle &= \lambda_1\langle u|\hat{O}_1 v\rangle + \lambda_2\langle u|\hat{O}_2 v\rangle \\ &= \lambda_1\langle \hat{O}_1^+ u|v\rangle + \lambda_2\langle \hat{O}_2^+ u|v\rangle \\ &= \langle(\lambda_1^*\hat{O}_1^+ + \lambda_2^*\hat{O}_2^+)u|v\rangle\,,\end{aligned}$$

azaz

$$(\lambda_1\hat{O}_1 + \lambda_2\hat{O}_2)^+ = \lambda_1^*\hat{O}_1^+ + \lambda_2^*\hat{O}_2^+\,, \tag{155}$$

valamint operátorok szorzatának adjungáltja:

$$\langle u|\hat{O}_1\hat{O}_2 v\rangle = \langle \hat{O}_2^+\hat{O}_1^+ u|v\rangle\,,$$

tehát

$$\left(\hat{O}_1\hat{O}_2\right)^+ = \hat{O}_2^+\hat{O}_1^+\,. \tag{156}$$

A kvantummechanikában különösen fontosak a *hermitikus operátorok*, melyekre $\mathcal{D}_{\hat{O}} \subset \mathcal{D}_{\hat{O}^+}$ és $v, u \in \mathcal{D}_{\hat{O}}$

$$\langle u|\hat{O}v\rangle = \langle \hat{O}u|v\rangle\,, \tag{157}$$

azaz $\hat{O} \subset \hat{O}^{+}$, ami azt jelenti, hogy az $\hat{O}$ operátor értelmezési tartományán az $\hat{O}$ és $\hat{O}^{+}$ operátorok azonosan hatnak. Az értelmezési tartományok vizsgálata ezért elengedhetetlen annak megállapítása során, hogy egy operátor hermitikus-e.

Multiplikatív operátorok hermitikusak $f : L^2\left(\mathbb{R}^d\right) \to \mathbb{R}$ függvény esetén:

$$\langle\psi|\hat{f}\varphi\rangle = \int d^d r\, \psi^*\left(\vec{r}\right) f\left(\vec{r}\right) \varphi\left(\vec{r}\right) = \int d^d r\, \left(f\left(\vec{r}\right) \psi\left(\vec{r}\right)\right)^* \varphi\left(\vec{r}\right) = \langle\hat{f}\psi|\varphi\rangle \tag{158}$$

amennyiben az integrál létezik. Az impulzus operátor hermitikussága (az egyszerűség kedvéért egydimenzióban):

$$\langle\psi|\hat{p}\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\left(x\right) \frac{\hbar}{i} \frac{d\varphi\left(x\right)}{dx} = \frac{\hbar}{i}\left[\psi^*\left(x\right)\varphi\left(x\right)\right]_{\infty}^{\infty} - \frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi^*\left(x\right)}{dx}\varphi\left(x\right) \tag{159}$$

Mivel $\psi, \varphi \in \mathcal{D}_{\hat{p}} \subset L^2\left(\mathbb{R}\right)$, a kiintegrált rész eltűnik, ezért valóban fennáll a

$$\langle\psi|\hat{p}\varphi\rangle = \langle\hat{p}\psi|\varphi\rangle \tag{160}$$

azonosság. Ha viszont az $L^2\left([a,b]\right)$ Hilbert-téren vizsgáljuk a $\hat{p}$ operátor hermitikusságát, akkor az értelmezési tartományt le kell szűkítenünk az $L^2_\alpha\left([a,b]\right) = \left\{\psi : \psi\left(b\right) = e^{i\alpha}\psi\left(a\right)\right\}$ $(\alpha \in \mathbb{R})$ altérre. Az $L^2_\alpha\left([a,b]\right)$ altéren a $\hat{p}$ operátor megegyezik az adjungáltjával, ezért *önadjungált operátor* $(\mathcal{D}_{\hat{O}} = \mathcal{D}_{\hat{O}^+} = \mathcal{H})$.

Az (155) azonosság következtében hermitikus operátorok valós együtthatós lineárkombinációja is hermitikus operátor: $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$

$$(\lambda_1\hat{O}_1 + \lambda_2\hat{O}_2)^+ = \lambda_1\hat{O}_1 + \lambda_2\hat{O}_2 \tag{161}$$

míg hermitikus operátorok szorzatának adjungáltja,

$$(\hat{O}_1\hat{O}_2)^+ = \hat{O}_2\hat{O}_1\,. \tag{162}$$

Ebből adódik, hogy egy hermitikus operátor tetszőleges hatványa, $\hat{O}^n = \hat{O}\ldots\hat{O}$ (n-tagú szorzat) is hermitikus. Legyen $f\left(x\right) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$ egy analitikus függvény. Ekkor az operátor megfelelő függvényét az

$$f(\hat{O}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \hat{O}^n \tag{163}$$

kifejezéssel definiáljuk. Ha $\hat{O}$ hermitikus és az a_n együtthatók valósak, akkor az $f(\hat{O})$ operátor hermitikus.

Tétel: *Hermitikus operátor sajátértékei valósak.*

$$\hat{O}\, v = k\, v \to \langle v|\hat{O}\, v\rangle = k\,\langle v|\, v\rangle \tag{164}$$

$$\langle v|\hat{O}v\rangle = \langle\hat{O}v|v\rangle = \langle v|\hat{O}v\rangle^* = k^*\langle v|\, v\rangle \tag{165}$$

ahonnan $k \in \mathbb{R}$ következik.

Az eddig előforduló operátorok ($\hat{x}_i$, $\hat{p}_i$, $\hat{K}$, $\hat{V}$, $\hat{H}$) hermitikusak, azok sajátértékei valósak. A kvantummechanikában *a klasszikus fázistér változóihoz és azok függvényeihez, általában dinamikai mennyiségekhez, hermitikus operátorokat rendelünk*, melyek (valós) sajátértékeit a lehetséges mérési értékekkel azonosítjuk (l. Méréselmélet). Pongyolán azt szokták mondani, hogy mérhető fizikai mennyiségekhez rendelünk hermitikus operátorokat, de pl. a térfogat, nyomás, hőmérséklet ... nem tartoznak ezek közé!

Tétel: *Hermitikus operátorok különböző sajátértékekhez tartozó sajátvektorai ortogonálisak.*

$$\hat{O}\,v_1 = k_1\,v_1\,,\;\hat{O}\,v_2 = k_2\,v_2 \qquad (166)$$
$$(k_1, k_2 \in \mathbb{R},\; k_1 \neq k_2)$$

$$\langle v_2|\hat{O}v_1\rangle = k_1\langle v_2|v_1\rangle \qquad (167)$$
$$\langle \hat{O}v_2|v_1\rangle = k_2\langle v_2|v_1\rangle\,, \qquad (168)$$

innen

$$(k_1 - k_2)\,\langle v_2|v_1\rangle = 0 \to \langle v_2|v_1\rangle = 0\,. \qquad (169)$$

Mivel egy adott sajátértékhez tartozó sajátvektorokat (degenerált sajátérték) a Gram-Schmidt eljárással ortogonalizálhatjuk, kijelenthetjük, hogy egy hermitikus operátor sajátvektorait mindig kereshetjük úgy, hogy azok páronként ortogonális vektorok legyenek, azaz - normálás után - ortonormált rendszert alkotnak a Hilbert-téren.

Megjegyzés: Korlátos hermitikus operátorok esetében a sajátvektorok halmaza megszámlálhatóan végtelen számosságú. Nemkorlátos hermitikus operátoroknak lehet folytonos spektruma általánosított sajátfüggvényekkel, melyek nem elemei a Hilbert-térnek, viszont a duális Hilbert-tér elemei, melybe a Hilbert-tér beágyazható (Riesz-féle reprezentációs tétel, l. később).

Spektráltétel: *Hermitikus operátorok sajátvektorai teljes rendszert alkotnak a Hilbert-téren.*

Következmény: *A hermitikus operátorok sajátvektorai megválaszthatók úgy, hogy azok teljes ortonormált rendszert (TONR) alkossanak a Hilbert-téren.*

Tétel: *Két hermitikus operátor akkor és csak akkor felcserélhető, ha létezik közös sajátfüggvény rendszerük.*

Bizonyítás:

(1) Legyen a két hermitikus operátor $\hat{A}$ és $\hat{B}$, melyekre $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Legyen v az $\hat{A}$ operátor sajátvektora, $\hat{A}v = av$. Ekkor

$$\hat{B}\hat{A}v = a\,\hat{B}v = \hat{A}(\hat{B}v) \qquad (170)$$

tehát $\hat{B}v$ is az $\hat{A}$ operátor sajátvektora a sajátértékkel.

Ha a nemdegenerált sajátérték, akkor $\hat{B}v = cv$, tehát v a $\hat{B}$ operátor sajátvektora. Ha a az $\hat{A}$ operátor degenerált sajátérték és $\{v_n\}_{n=1,\ldots,N}$ ortonormált sajátvektorok. Ekkor $\{\hat{B}v_n\}_{n=1,\ldots,N}$ ugyancsak az $\hat{A}$ operátor sajátvektorai a sajátértékkel, ezért

$$\hat{B}v_n = \sum_{i=1}^{N} v_i c_{in}\,. \qquad (171)$$

ahol

$$c_{in} = \langle v_i|\hat{B}v_n\rangle = \langle \hat{B}v_i|v_n\rangle = c^*_{ni} \qquad (172)$$

tehát a $\mathbf{C} = \{c_{in}\}$ $N \times N$-es mátrix önadjungált. A mátrix ortonormált sajátvektorainak

$$\mathbf{C}\underline{u}_i = \lambda_i \underline{u}_i\,,\; \underline{u}_j^+ \underline{u}_i = \delta_{ij}\,, \qquad (173)$$

felhasználásával diagonalizálni tudjuk a $\mathbf{C}$ mátrixot:

$$\mathbf{U} = \{u_{ki}\}\,,\; \mathbf{U}^+ = \left\{u^+_{ik}\right\} \qquad (174)$$

ahol u_{ki} az $\underline{u}_i$ (oszlop)vektor, u_{ik}^+ pedig az $\underline{u}_i^+$ (sor)vektor k-ik eleme. Ekkor

$$\sum_{k=1}^{N} u_{jk}^+ u_{ki} = \delta_{ij} \to \mathbf{U}^+\mathbf{U} = \mathbf{I} \tag{175}$$

azaz az $\mathbf{U}$ unitér mátrix, és a

$$\sum_{k=1}^{N} c_{lk} u_{ki} = u_{li}\lambda_i \tag{176}$$

sajátértékegyenletet átírhatjuk a

$$\mathbf{CU} = \mathbf{U}\,\mathrm{diag}\left(\{\lambda_i\}\right) \to \mathbf{U}^+\mathbf{CU} = \mathrm{diag}\left(\{\lambda_i\}\right) \tag{177}$$

mátrixalakra, ahol $\mathrm{diag}\left(\{\lambda_i\}\right)$ egy diagonálmátrix a λ_i átlóselemekkel. Bevezetve a

$$v_i = \sum_{k=1}^{N} v_k' u_{ki}^+ \to v_i' = \sum_{k=1}^{N} v_k u_{ki} \tag{178}$$

unitér transzformációt és behelyettesítve a (171) egyenletbe,

$$\sum_{k=1}^{N} \hat{B} v_k' u_{kn}^+ = \sum_{l,i=1}^{N} v_l' u_{li}^+ c_{in} \tag{179}$$

adódik, hogy

$$\hat{B} v_j' = \sum_{l,i,n=1}^{N} v_l' u_{li}^+ c_{in} u_{nj} = \lambda_j v_j' \tag{180}$$

azaz a v_j' vektorok, melyek nyilván az $\hat{A}$ operátor sajátvektorai a sajátértékkel, egyúttal a $\hat{B}$ operátor sajátvektorai is λ_j sajátértékkel.

(2) Ha létezik $\{v_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ közös sajátfüggvényrendszer, mely egyben TONR is,

$$\hat{A} v_n = a_n v_n \tag{181}$$
$$\hat{B} v_n = b_n v_n \tag{182}$$

akkor bármely $v \in \mathcal{H}$, $v = \sum_{n\in\mathbb{N}} c_n v_n$ és akkor

$$\hat{A} v = \sum_{n\in\mathbb{N}} c_n \left(\hat{A} v_n\right) = \sum_{n\in\mathbb{N}} c_n a_n v_n \to \hat{B}\hat{A} v = \sum_{n\in\mathbb{N}} c_n a_n (\hat{B} v_n) = \sum_{n\in\mathbb{N}} c_n a_n b_n v_n \tag{183}$$
$$\hat{B} v = \sum_{n\in\mathbb{N}} c_n \left(\hat{B} v_n\right) = \sum_{n\in\mathbb{N}} c_n b_n v_n \to \hat{A}\hat{B} v = \sum_{n\in\mathbb{N}} c_n b_n (\hat{A} v_n) = \sum_{n\in\mathbb{N}} c_n b_n c_n v_n \tag{184}$$

azaz

$$\hat{B}\hat{A} v = \hat{A}\hat{B} v \to \hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B} \tag{185}$$

tehát a két operátor felcserélhető.

6.4. Diszkrét reprezentációk, mátrixmechanika

Már korábban megállapítottuk, hogy egy részecske állapotát a $\psi \in L^2\left(\mathbb{R}^d\right)$ függvény helyett egyértelműen jellemezhetjük egy $\underline{c} \in \ell^2$ vektorral, ahol

$$\psi = \sum_{n\in\mathbb{N}} c_n \varphi_n \tag{186}$$

és $\{\varphi_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ TONR az $L^2\left(\mathbb{R}^d\right)$ Hilbert-téren. Ezt általánosítva, $L^2\left(\mathbb{R}^d\right)$ helyett bármely $\mathcal{H}$ megszámlálhatóan végtelen dimenziós (szeparábilis) Hilbert-teret vehetünk és

$$c_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle \,.$$

A $\underline{c} = \{c_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ vektort az állapot egy *diszkrét ábrázolás*ának nevezzük. A ψ állapotvektort felírhatjuk a

$$\psi = \sum_{n\in\mathbb{N}} \varphi_n \langle \varphi_n | \psi \rangle \tag{187}$$

alakban. Vegyük észre, hogy a jobboldali összegben szereplő kifejezések a ψ projekciói a φ_n bázisvektorokra,

$$\hat{P}_{\varphi_n} \psi = \varphi_n \left\langle \varphi_n | \psi \right\rangle \,, \tag{188}$$

ami a háromdimenziós térben ismert vetítés általánosítása. A projekció általános definiciója,

$$\hat{P}^2_{\varphi_n} = \hat{P}_{\varphi_n} \,, \tag{189}$$

amit könnyen beláthatunk,

$$\hat{P}^2_{\varphi_n} \psi = \hat{P}_{\varphi_n} \varphi_n \left\langle \varphi_n | \psi \right\rangle = \varphi_n \underbrace{\langle \varphi_n | \varphi_n \rangle}_{=1} \langle \varphi_n | \psi \rangle = \varphi_n \langle \varphi_n | \psi \rangle = \hat{P}_{\varphi_n} \psi \,. \tag{190}$$

A (187) egyenlet átírása projektorokkal,

$$\psi = \sum_{n\in\mathbb{N}} \hat{P}_{\varphi_n} \psi \,, \tag{191}$$

ami alapján a $\{\varphi_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ rendszer teljességét kifejezhetjük a

$$\sum_{n\in\mathbb{N}} \hat{P}_{\varphi_n} = \hat{I} \tag{192}$$

operátor azonossággal is. A P_φ projektorra, Paul Adrien Maurice Dirac nyomán a fizikusok a

$$\hat{P}_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi| \tag{193}$$

jelölést használják, melyben az angol szóhasználatot követve a $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$ vektort *ket-vektor*nak, a $\langle\varphi|$-t pedig *bra-vektor*nak hívjuk. Ez utóbbinak az ad jelentést, hogy a $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ket-vektorra hatva a $\langle\varphi|\psi\rangle$ skalárszorzatot kapjuk eredményül. (A bra-vektorok valójában a duális Hilbert-tér elemei, melyre a folytonos spektrum tárgyalásánál még visszatérünk.) A Dirac-féle bra-ket jelöléssel a (187) és (192) egyenleteket a

$$|\psi\rangle = \sum_{n\in\mathbb{N}} |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle \tag{194}$$

és

$$\sum_{n\in\mathbb{N}} |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \hat{I} \tag{195}$$

vagy sokszor még egyszerűbben a

$$\sum_{n\in\mathbb{N}} |n\rangle\langle n| = \hat{I}$$

alakban írjuk. A projektorok segítségével kimondhatjuk még a spektráltétel alternatív megfogalmazását: alkalmasan választott TONR-ben bármely $\hat{O}$ hermitikus operátor előáll a

$$\hat{O} = \sum_{n\in\mathbb{N}} \lambda_n |n\rangle\langle n|$$

alakban, ahol λ_n az $\hat{O}$ sajátértékei.

Térjünk vissza az állapotok diszkrét ábrázolására. Ha egy másik bázist választunk, akkor nyilván más vektor fogja reprezentálni ugyanazt az állapotot. Legyen $\{v_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ és $\{u_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ két TONR a $\mathcal{H}$ Hilbet-téren. Ekkor, használva a Dirac-jelölést,

$$|\psi\rangle = \sum_{n\in\mathbb{N}} c_n^{(v)}|v_n\rangle = \sum_{n\in\mathbb{N}} c_n^{(u)}|u_n\rangle\,, \tag{196}$$

ahol

$$c_n^{(v)} = \langle v_n|\psi\rangle \quad \text{és} \quad c_n^{(u)} = \langle u_n|\psi\rangle\,. \tag{197}$$

Mi a kapcsolat a két ábrázolás között? Az u_n vektorokat felírhatjuk a v_n vektorok lineárkombinációjaként,

$$|u_n\rangle = \sum_{k\in\mathbb{N}} |v_k\rangle\, U_{kn}\,, \quad U_{kn} = \langle v_k|u_n\rangle\,. \tag{198}$$

Könnyen belátható, hogy az $\mathbf{U} = \{U_{kn}\}$ mátrix unitér, ugyanis

$$\langle u_m|u_n\rangle = \sum_{k,l\in\mathbb{N}} U_{lm}^*\underbrace{\langle v_l|\nu_k\rangle}_{\delta_{lk}}U_{kn} = \sum_{k\in\mathbb{N}} U_{km}^* U_{kn} = \delta_{mn} \tag{199}$$

ami pont az

$$\mathbf{U}^+\mathbf{U} = \mathbf{I} \tag{200}$$

mátrix-egyenletet jelenti. Könnyen felírható a $c_n^{(v)}$ és $c_n^{(u)}$ közötti kapcsolat is:

$$c_n^{(v)} = \langle v_n|\psi\rangle = \sum_{k\in\mathbb{N}} c_k^{(u)}\langle v_n|u_k\rangle = \sum_{k\in\mathbb{N}} U_{nk}\, c_n^{(u)}\,. \tag{201}$$

azaz

$$\underline{c}^{(v)} = \mathbf{U}\underline{c}^{(u)} \tag{202}$$

illetve

$$\underline{c}^{(u)} = \mathbf{U}^+\underline{c}^{(v)}\,. \tag{203}$$

A két diszkrét ábrázolást tehát egy *unitér transzformáció* köti össze. Ez biztosítja, hogy az állapot normája mindkét ábrázolásban megegyezik:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \underline{c}^{(u)\dagger}\underline{c}^{(u)} = \underline{c}^{(\nu)\dagger}\mathbf{U}\mathbf{U}^+\underline{c}^{(\nu)} = \underline{c}^{(\nu)\dagger}\underline{c}^{(\nu)}\,. \tag{204}$$

Hogyan dolgozunk az operátorokkal egy diszkrét ábrázolásban? Ehhez számítsuk ki az $\hat{O}\psi$ állapotot ábrázoló számvektort a $\{v_n\}$ bázison,

$$\hat{O}\psi = \sum_{n\in\mathbb{N}} d_n^{(v)} v_n \tag{205}$$

ahol

$$d_n^{(v)} = \langle v_n|\hat{O}\psi\rangle = \langle v_n|\hat{O}(\sum_{m\in\mathbb{N}} c_m^{(v)} v_m)\rangle = \sum_{m\in\mathbb{N}}\langle v_n|\hat{O}v_m\rangle\, c_m^{(v)} \tag{206}$$

ahol felhasználtuk, hogy mind az $\hat{O}$ operátor, mind a skalárszorzat lineáris. Az $\hat{O}$ operátor ábrázolására tehát célszerű bevezetni az

$$\mathbf{O}^{(\nu)} = \{O_{nm}^{(\nu)}\}\,, \quad O_{nm}^{(\nu)} = \langle v_n|\hat{O}v_m\rangle \tag{207}$$

mátrixot, mert így az $\hat{O}\psi$ állapot ábrázolása,

$$d_n^{(v)} = \sum_{m\in\mathbb{N}} O_{nm}^{(\nu)}\, c_m^{(v)} \to \underline{d}^{(\nu)} = \mathbf{O}^{(\nu)}\underline{c}^{(v)}\,. \tag{208}$$

Hermitikus operátor diszkrét ábrázolása önadjungált mátrix:

$$O_{nm}^{(\nu)} = \langle v_n|\hat{O}v_m\rangle = O_{nm}^{(\nu)} = \langle\hat{O}v_n|v_m\rangle = \langle v_m|\hat{O}v_n\rangle^* = O_{mn}^{(\nu)*} \to \mathbf{O}^{(\nu)+} = \mathbf{O}^{(\nu)}. \tag{209}$$

Az operátor sajátértékeit az ábrázoló mátrix sajátérték-problémájának megoldásával kaphatjuk meg:

$$\hat{O}|\psi\rangle = k|\psi\rangle \to \sum_{n\in\mathbb{N}} c_n^{(v)}\hat{O}|v_n\rangle = k\sum_{n\in\mathbb{N}} c_n^{(v)}|v_n\rangle \tag{210}$$

majd a $|v_m\rangle$ vektorral skalárszorozva,

$$\sum_{n\in\mathbb{N}} O_{mn}^{(\nu)}\, c_n^{(v)} = k\, c_m^{(v)} \leftrightarrow \mathbf{O}^{(\nu)}\underline{c}^{(v)} = k\,\underline{c}^{(v)}\,. \tag{211}$$

Az operátorok különböző diszkrét ábrázolásai közötti kapcsolat egyszerűen levezethető:

$$O_{nm}^{(u)} = \langle u_n|\hat{O}u_m\rangle = \sum_{k,l\in\mathbb{N}} U_{kn}^*\langle\nu_k|\hat{O}\nu_l\rangle U_{lm} = \sum_{k,l\in\mathbb{N}} U_{kn}^* O_{kl}^{(\nu)} U_{lm} \tag{212}$$

azaz

$$\mathbf{O}^{(u)} = \mathbf{U}^+\mathbf{O}^{(\nu)}\mathbf{U}\,, \tag{213}$$

az $\mathbf{O}^{(u)}$ és $\mathbf{O}^{(\nu)}$ mátrixok tehát *unitérekvivalens*ek. Ennek számos hasznos következménye van. Önadjungált mátrix unitérekvivalense is önadjungált:

$$\mathbf{O}^{(u)+} = (\mathbf{U}^+\mathbf{O}^{(\nu)}\mathbf{U})^+ = \mathbf{U}^+\mathbf{O}^{(\nu)}\mathbf{U} = \mathbf{O}^{(u)}\,. \tag{214}$$

Ugyanazon operátor sajátértékei unitérekvivalens ábrázolásokban megegyeznek:

$$\mathbf{O}^{(\nu)}\underline{c}^{(v)} = k\,\underline{c}^{(v)} \leftrightarrow \mathbf{U}^+\mathbf{O}^{(\nu)}\mathbf{U}\mathbf{U}^+\underline{c}^{(v)} = k\,\mathbf{U}^+\underline{c}^{(v)} \leftrightarrow \mathbf{O}^{(u)}\underline{c}^{(u)} = k\,\underline{c}^{(u)}\,. \tag{215}$$

Nézzük meg, hogy az állapotot meghatározó Schrödinger-egyenlet hogyan írható fel diszkrét reprezentációban! Mivel a bázisvektorok időfüggetlenek, az állapot időfüggését a $\underline{c}$ vektor időfüggése kódolja:

$$\psi\left(t,\vec{r}\right) = \sum_{n\in\mathbb{N}} c_n\left(t\right)\,\varphi_n\left(\vec{r}\right)\,. \tag{216}$$

Ezt behelyettesítjük az időfüggő Schrödinger-egyenletbe,

$$i\hbar\sum_{n\in\mathbb{N}}\dot{c}_n\left(t\right)\,\varphi_n\left(\vec{r}\right) = \sum_{n\in\mathbb{N}} c_n\left(t\right)\,H\left(\vec{r},t\right)\varphi_n\left(\vec{r}\right) \tag{217}$$

ahol

$$H\left(\vec{r},t\right)\varphi_n\left(\vec{r}\right)=(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\left(\vec{r},t\right))\varphi_n\left(\vec{r}\right)\ . \tag{218}$$

Felhasználva a $\varphi_n\left(\vec{r}\right)$ függvények ortonormáltságát az

$$i\hbar\dot{c}_n\left(t\right)=\sum_{m\in\mathbb{N}}H_{nm}\left(t\right)c_m\left(t\right) \tag{219}$$

illetve

$$i\hbar\dot{\underline{c}}\left(t\right)=\mathbf{H}\left(t\right)\underline{c}\left(t\right) \tag{220}$$

egyenletet nyerjük, ahol

$$H_{nm}\left(t\right)=\langle\varphi_n|\hat{H}\left(t\right)\varphi_m\rangle=\int d^3r\,\varphi_n^*\left(\vec{r}\right)(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\left(\vec{r},t\right))\varphi_m\left(\vec{r}\right) \tag{221}$$

a Hamilton-operátor mátrixelemei a bázison. A (219) vagy (220) egyenlet a Werner Heisenberg nevéhez fűződő *mátrixmechanika* mozgásegyenlete, mely ekvivalens a *hullámmechanika* Schrödinger-egyenletével.

Ha potenciális energia időfüggetlen, akkor a Hamilton-operátor mátrixa is az,

$$i\hbar\dot{\underline{c}}\left(t\right)=\mathbf{H}\,\underline{c}\left(t\right)\ . \tag{222}$$

A $\mathbf{H}$ önadjungált mátrix sajátvektorai,

$$\mathbf{H}\,\underline{s}_n=E_n\,\underline{s}_n\,, \tag{223}$$

teljes ortonormált rendszert alkotnak az ℓ^2 téren, így a $\underline{c}\left(t\right)$ állapotvektorok kifejezhetők a sajátvektorokkal,

$$\underline{c}\left(t\right)=\sum_{n\in\mathbb{N}}k_n\left(t\right)\underline{s}_n \tag{224}$$

és a

$$i\hbar\dot{k}_n\left(t\right)=E_nk_n\left(t\right) \tag{225}$$

egyenletet kapjuk, melynek megoldása

$$k_n\left(t\right)=a_ne^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}\ . \tag{226}$$

Stacionárius esetben a Schödinger-egyenlet megoldását felírhatjuk a

$$\underline{c}\left(t\right)=\sum_{n\in\mathbb{N}}a_ne^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}\,\underline{s}_n \tag{227}$$

alakban, ahol az a_n együtthatókat a $\underline{c}\left(t_0\right)=\underline{c}_0$ kezdeti feltétel rögzíti. Az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet nyilvánvalóan a Hamilton-mátrix sajátértékegyenlete helyettesíti.

6.5. A lineáris harmonikus oszcillátor spektruma: keltő és eltüntető operátorok

Már korábban levezettük a

$$\left(\frac{d}{dq}-q\right)\left(\frac{d}{dq}+q\right)=\frac{d^2}{dq^2}-q^2+1\,,$$

összefüggést, mely segítségével a lineáris harmonikus oszcillátor Hamilton operátora kifejezhető

$$H\left(q\right)=\hbar\omega\left\{\frac{1}{2}\left(q-\frac{d}{dq}\right)\left(q+\frac{d}{dq}\right)+\frac{1}{2}\right\} \tag{228}$$

alakban. Célszerű bevezetni az

$$a=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(q+\frac{d}{dq}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\left(x+x_0^2\frac{d}{dx}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\left(x+\frac{i}{m\omega}p\right) \tag{229}$$

és

$$a^+=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(q-\frac{d}{dq}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\left(x-x_0^2\frac{d}{dx}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\left(x-\frac{i}{m\omega}p\right) \tag{230}$$

operátorokat, melyekkel tehát

$$H=\hbar\omega\{a^+a+\frac{1}{2}\}\,. \tag{231}$$

Ezt az a és a^+ operátorok definícióiból közvetlenül is megkaphatjuk:

$$\begin{aligned}a^+a&=\frac{1}{2x_0^2}\left(x-\frac{i}{m\omega}p\right)\left(x+\frac{i}{m\omega}p\right)=\frac{x^2}{2x_0^2}+\frac{p^2}{2m^2\omega^2x_0^2}+\frac{i}{2m\omega x_0^2}\left[x,p\right]\\&=\frac{m\omega x^2}{2\hbar}+\frac{p^2}{2\hbar m\omega}+\frac{i}{2\hbar}i\hbar=\frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{m\omega^2x^2}{2}+\frac{p^2}{2m}\right)-\frac{1}{2}=\frac{1}{\hbar\omega}H-\frac{1}{2}\,,\end{aligned}$$

ahol felhasználtuk az

$$[x,p]=i\hbar$$

felcserélési relációt. Ebben a fejezetben megmutatjuk, hogy a harmonikus oszcillátor spektruma levezethető az a és a^+ operátorok algebrai (felcserélési) tulajdonságaiból, és nem szükséges valamely konkrét reprezentációt használnunk. Ugyancsak a (229) és (230) definíciók alapján

$$\begin{aligned}\left[a,a^+\right]&=\frac{1}{2x_0^2}\left[x+\frac{i}{m\omega}p,x-\frac{i}{m\omega}p\right]\\&=\frac{m\omega}{2\hbar}\left(-\frac{i}{m\omega}\left[x,p\right]+\frac{i}{m\omega}\left[p,x\right]\right)=1\,.\end{aligned} \tag{232}$$

A (231) kifejezés következménye, hogy a Hamilton operátor spektrumának alsó korlátja $\hbar\omega/2$:

$$\langle\psi|\,H\,|\psi\rangle=\hbar\omega\left(\langle\psi|\,a^+a\,|\psi\rangle+\frac{1}{2}\right)=\hbar\omega\left(\left|a\psi\right|^2+\frac{1}{2}\right)\geq\frac{\hbar\omega}{2}\quad. \tag{233}$$

Fennállnak továbbá a következő kommutációs relációk:

$$[H,a]=-\hbar\omega a\quad\text{ill.}\quad\left[H,a^+\right]=\hbar\omega a^+\quad. \tag{234}$$

Ugyanis

$$[H,a]=\hbar\omega\left[a^+a+\frac{1}{2},a\right]=\hbar\omega\left[a^+,a\right]a=-\hbar\omega a \tag{235}$$

és

$$\left[H, a^{+}\right] = \hbar\omega \left[a^{+}a + \frac{1}{2}, a^{+}\right] = \hbar\omega a^{+} \left[a, a^{+}\right] = \hbar\omega a^{+} \,. \tag{236}$$

Legyen $|\psi\rangle$ H egy sajátvektora E sajátértékkel. Ekkor

$$Ha|\psi\rangle = aH|\psi\rangle - \hbar\omega a|\psi\rangle = (E - \hbar\omega)\, a|\psi\rangle \,, \tag{237}$$

azaz $a|\psi\rangle$ is H sajátvektora $E - \hbar\omega$ sajátértékkel. Ezért hívjuk az a operátort *lefelé léptető* vagy eltüntető operátornak. Mivel azonban H spektruma alulról korlátos, léteznie kell egy $|\psi_0\rangle$ sajátvektornak, amit az a operátor a Hilbert-tér null-elemébe ($|\,\rangle_0$) léptet, melynek normája zérus, ezért nem reprezentál fizikai állapotot,

$$a|\psi_0\rangle = |\,\rangle_0 \,. \tag{238}$$

Nyilvánvalóan

$$a^{+}a|\psi_0\rangle = |\,\rangle_0 \quad \to \quad H|\psi_0\rangle = \hbar\omega \left(|\,\rangle_0 + \frac{1}{2}|\psi_0\rangle\right) = \frac{\hbar\omega}{2}|\psi_0\rangle \,, \tag{239}$$

tehát $|\psi_0\rangle$ pontosan a minimális sajátértékhez tartozó sajátvektor.

A (237) egyenlethez hasonlóan beláthatjuk:

$$Ha^{+}|\psi\rangle = a^{+}H|\psi\rangle + \hbar\omega a|\psi\rangle = (E + \hbar\omega)\, a^{+}|\psi\rangle \,, \tag{240}$$

azaz $a^{+}|\psi\rangle$ is H sajátvektora $E + \hbar\omega$ sajátértékkel. Ezért az a^{+} operátort *felfelé léptető* vagy keltő operátornak hívjuk. A keltő operátor egymás utáni alkalmazásával előállíthatjuk a Hamilton operátor többi sajátvektorát. Jelöljük az n-ik lépésben kapott sajátvektort $|n\rangle$-nel! Ekkor

$$|n\rangle = A_n \left(a^{+}\right)^n |0\rangle \,, \tag{241}$$

ahol $|\psi_0\rangle \equiv |0\rangle$ és A_n egy később meghatározandó normálási tényező. Az n-ik lépésben kapott sajátenergia értelemszerűen

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \,. \tag{242}$$

Ezektől különböző sajátérték nem létezhet, hiszen bármely sajátérték csak $\hbar\omega$ egészszámszorosával különbözhet $\frac{\hbar\omega}{2}$-től.

A sajátvektorok egyértelműségét a következő tétel biztosítja: *Az egydimenziós Schrödinger-egyenlet kötött (reguláris) megoldásai nem lehetnek elfajultak.*

A (231) és (242) egyenletek összevetéséből azonnal következik, hogy

$$a^{+}a|n\rangle = n\,|n\rangle \,.$$

Az $a^{+}a$ operátort ezért szokás *gerjesztési szám* operátornak nevezni. Legyenek $|n\rangle$ és $|n+1\rangle$ normált sajátvektorok. Ekkor

$$a^{+}|n\rangle = c|n+1\rangle \,, \tag{243}$$

ahol c egy valósnak választható konstans. Innen

$$c^2 = \langle n|aa^{+}|n\rangle = \langle n|a^{+}a + 1|n\rangle = n + 1$$

azaz

$$a^{+}|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \,. \tag{244}$$

Hasonlóan könnyű belátni, hogy

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle\,. \tag{245}$$

Ugyanis:

$$a|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}a\,a^+|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\left(a^+a+1\right)|n-1\rangle = \frac{(n-1)+1}{\sqrt{n}}|n-1\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle\,. \tag{246}$$

A normált sajátfüggvektorokat tehát a következő alakban állnak elő,

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^+\right)^n|0\rangle\,. \tag{247}$$

6.5.1. A sajátfüggvények koordinátareprezentációban

Határozzuk meg először az ún. vákuumállapotot:

$$a\psi_0(q) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d\psi_0(q)}{dq} + q\psi_0(q)\right) = 0\,, \tag{248}$$

melynek ismert megoldása

$$\psi_0(q) = c_0\exp(-q^2/2) \quad . \tag{249}$$

A c_0 normálási konstanst a következő integrál alapján számítjuk,

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}\psi_0^*(x)\psi_0(x)dx = c_0^2\int\limits_{-\infty}^{\infty}e^{-(x/x_0)^2}dx = c_0^2\,x_0\int\limits_{-\infty}^{\infty}e^{-q^2}dq = c_0^2\sqrt{\pi}x_0 = 1$$

$$\rightarrow\; c_0 = (\sqrt{\pi}x_0)^{-1/2} \quad . \tag{250}$$

A normált sajátfüggvények tehát

$$\psi_n(x) = \left(2^n n!\sqrt{\pi}x_0\right)^{-1/2}\left(q - \frac{d}{dq}\right)^n e^{-q^2/2}\bigg|_{q=x/x_0}\,, \tag{251}$$

vagy

$$\psi_n(x) = \left(2^n n!\sqrt{\pi}x_0\right)^{-1/2}H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)e^{-(x/x_0)^2/2}\,, \tag{252}$$

ahol

$$H_n(q) = e^{q^2/2}\left(q - \frac{d}{dq}\right)^n e^{-q^2/2}\,, \tag{253}$$

a jól ismert Hermite polinomok.

Bizonyíthatók a következő rekurziós összefüggések:

$$H_{n+1}(q) = 2qH_n(q) - H_n'(q)\,, \tag{254}$$

$$H_n'(q) = 2nH_{n-1}(q)\,, \tag{255}$$

és

$$2qH_n(q) = H_{n+1}(q) + 2nH_{n-1}'(q) \quad , \tag{256}$$

6.6. Folytonos reprezentációk

6.7. A koordináta operátor spektruma, koordináta reprezentáció

Jelöljük az $\hat{x}$ koordináta operátor valamely x_0 sajátértékhez tartozó sajátfüggvényét δ_{x_0}-lal,

$$\left(\hat{x}\,\delta_{x_0}\right)(x) = x\delta_{x_0}(x) = x_0\,\delta_{x_0}(x) \to (x_0 - x)\;\delta_{x_0}(x) = 0\,. \tag{257}$$

Ez azt jelenti, hogy $\delta_{x_0}(x) = 0$, ha $x \neq x_0$, és értéke nem meghatározott az $x = x_0$ pontban, azaz δ_{x_0} nem reguláris függvény. Az x_0 pont tetszőlegesen kis környezetében Taylor-sorba fejthető $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ függvényre,

$$\psi(x) = \sum_i c_i\;(x - x_0)^i \quad (x_0 - \varepsilon < x < x_0 + \varepsilon) \tag{258}$$

fennáll, hogy

$$\langle\psi|\delta_{x_0}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\;\delta_{x_0}(x)\,dx = \sum_i c_i^* \int_{-\infty}^{\infty} x^i\,\delta_{x_0}(x)\,dx = \sum_i c_i^* x_0^i = \psi(x_0)^*\;, \tag{259}$$

vagy

$$\psi(x_0) = \langle\delta_{x_0}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \delta_{x_0}(x)\;\psi(x)\;dx\,. \tag{260}$$

A (260) egyenlet valójában a

$$\delta_{x_0} : L^2(\mathbb{R}) \to \mathbb{C} \quad \delta_{x_0}(\psi) = \psi(x_0) \tag{261}$$

lineáris funkcionált definiálja, amit *általánosított függvény*nek vagy *disztribúció*nak nevezünk. A δ-disztribúciót Paul Dirac vezette be, ezért Dirac-deltának szokták hívni, sokszor formálisan függvényként kezeljük és $\delta(x - x_0)$-lal jelöljük. A koordináta operátornak tehát az $L^2(\mathbb{R})$ téren nincsen sajátfüggvénye, viszont, tetszőleges $x_0 \in \mathbb{R}$ esetén létezik δ_{x_0} általánosított függvénye, ezért a valós számok halmazát az $\hat{x}$ operátor *folytonos spektrum*ának nevezzük.

Ha $\mathcal{H}$ Hilbert-tér, akkor a $\mathcal{H}^* = \{\ell \mid \mathcal{H} \to \mathbb{C}\ \text{lineáris és folytonos}\}$ halmazt a Hilbert-tér *duális terének* nevezzük.

Riesz reprezentációs tétel: $\forall \ell \in \mathcal{H}^*\ \exists!\, u \in \mathcal{H}$, hogy $\ell(v) = \langle u|v\rangle$ $(\forall v \in \mathcal{H})$.

Nyilvánvaló, hogy $u \in \mathcal{H}$ az $\ell(v) = \langle u|v\rangle \in \mathbb{C}$ $(\forall v \in \mathcal{H})$ lineáris funkcionál korlátos, mivel a CBS egyenlőtlenség miatt

$$|\ell(v)| = \sqrt{\langle u|v\rangle\langle v|u\rangle} \leq |u||v| \quad (\forall v \in \mathcal{H})\;. \tag{262}$$

Másrészt az $\ell \in \mathcal{H}^*$ normája,

$$|\ell| = \sup_{v\in\mathcal{H}} \frac{|\ell(v)|}{|v|} = |u|\,, \tag{263}$$

amit a $v = u$ választással láthatunk be. Így $\mathcal{H}$ és $\mathcal{H}^*$ között távolságtartó (izometrikus) izomorfizmus áll fenn. A skalárszorzatot definiálhatjuk a duális téren is : $\ell(v) = \langle u|v\rangle$ és $k(v) = \langle w|v\rangle \to \langle\ell|k\rangle \equiv \langle u|w\rangle$, és belátható, hogy $\mathcal{H}^*$ is Hilbert-tér. A Dirac-féle jelölésben az $|u\rangle$ ket-vektor a $\mathcal{H}$, míg az $\langle u|$ bra-vektor a $\mathcal{H}^*$ elemét jelölik, melyek azonban kölcsönösen megfeleltethetők egymásnak.

Egy $\hat{O} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ lineáris operátornak ugyancsak megfeleltethető egy $\hat{O}^* : \mathcal{H}^* \to \mathcal{H}^*$ lineáris operátor:

$$\hat{O}^*\ell = \langle u|\hat{O} \to \left(\hat{O}^*\ell\right)(v) = \langle u|\hat{O}v\rangle \quad (\forall v \in \mathcal{H}) \tag{264}$$

Az $\hat{O}^*$ sajátértékegyenlete,

$$\hat{O}^*\ell = \lambda\ell \to \langle u|\hat{O}v\rangle = \lambda\langle u|v\rangle \to \langle v|\hat{O}^+u\rangle = \lambda^*\langle v|u\rangle \to \hat{O}^+u = \lambda^*u\,. \tag{265}$$

$\hat{O}^*$ sajátértékei tehát megegyzenek $\hat{O}$ sajátértékeinek komplex konjugáltjával. Ha $\hat{O}$ hermitikus, akkor $\hat{O}^*$ is az, valamint $\hat{O}$ és $\hat{O}^*$ sajátértékei megegyeznek. A $\langle\delta_{x_0}| \in \mathcal{H}^*$ disztribúciót tehát érdemes az $\hat{x}^*$ operátor sajátvektoraként definiálni:

$$\langle\hat{x}\delta_{x_0}|\psi\rangle = x_0\langle\delta_{x_0}|\psi\rangle \quad \forall\psi \in L^2(\mathbb{R})\;. \tag{266}$$

Ebből következik, hogy

$$\langle\delta_{x_0}|\hat{x}\psi\rangle = x_0\langle\delta_{x_0}|\psi\rangle \to \langle\delta_{x_0}|\left(\hat{x} - x_0\right)\psi\rangle = 0\,, \tag{267}$$

ami a (260) definíció szerint nyilvánvalóan teljesül.

A δ_{x_0} disztribúciót előállíthatjuk $L^2(\mathbb{R})$-beli függvények által meghatározott (reguláris) disztribúciók határértékeként. Vegyük a

$$u_n(x) = \begin{cases} n & \text{ha} \quad x_0 - \frac{1}{2n} \le x \le x_0 + \frac{1}{2n} \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases} \tag{268}$$

$(n = 1, 2, \ldots)$ függvénysorozatot. Nyilvánvaló, hogy

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x)\,u_n(x)\,dx = n < \infty \tag{269}$$

tehát $u_n \in L^2(\mathbb{R})$ és

$$\lim_{n\to\infty} u_n(x) = 0 \quad \text{ha} \quad x \neq x_0\,, \tag{270}$$

valamint x_0 tetszőlegesen kis környezetében folytonos ψ függvényre,

$$\lim_{n\to\infty}\int_{-\infty}^{\infty} u_n(x)\;\psi(x)\;dx = \psi(x_0)\;, \tag{271}$$

ezért a sorozat határértéke valóban azonosítható a δ_{x_0} disztribúcióval. Más előállítások is konstruálhatók, mint pl.

$$\delta(x - x_0) = \lim_{d\to 0}\frac{1}{\sqrt{2\pi d^2}}e^{-(x-x_0)^2/2d^2}\;, \tag{272}$$

azaz egy 'végtelen éles' normáleloszlás, vagy

$$\delta(x - x_0) = \lim_{t\to\infty}\frac{\sin^2(x - x_0)\,t}{(x - x_0)^2\,\pi t}\,, \tag{273}$$

amit majd az időfüggő perturbációszámításnál fogunk kihasználni. Maga a δ_{x_0} viszont nem reguláris, hanem ún. szinguláris disztribúció.

Ha $\{|\varphi_n\rangle \in L^2(\mathbb{R})\}$ TONR, a $|\psi\rangle$ állapot spektrális előállítása,

$$|\psi\rangle = \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle \tag{274}$$

illetve

$$\psi(x) = \sum_n \varphi_n(x)\,\langle\varphi_n|\psi\rangle = \sum_n \varphi_n(x)\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_n^*(x')\;\psi(x')\;dx' \tag{275}$$

amiből

$$\sum_n \varphi_n(x)\,\varphi_n^*(x') = \delta(x - x') \tag{276}$$

következik. Ez fejezi ki a φ_n függvények teljességét az $L^2(\mathbb{R})$ Hilbert-téren. Az ortonormáltság kifejezése,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x)\;\varphi_m(x)\;dx = \delta_{nm}\,. \tag{277}$$

A koordináta operátor általánosított sajátfüggvényeire a fentieket a következőképpen terjeszthetjük ki:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x'')\;\psi(x'')\;dx'' = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x'')\;\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x' - x'')\,\psi(x')\;dx'\,dx'' \tag{278}$$

amiből

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x'')\,\delta(x' - x'')\,dx'' = \delta(x - x') \tag{279}$$

következik, amely szinonim a (276) összefüggéssel, de felfoghatjuk a (277) ortonormáltsági feltétel kiterjesztésének azzal, hogy Kronecker-delta helyett a Dirac-delta függvényre normálunk.

A diszkrét reprezentációk mintájára bevezethetjük a $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ *koordináta reprezentáció*ját,

$$\langle \delta_x | \psi \rangle = \psi(x) \tag{280}$$

vagy egyszerűbben

$$\langle x | \psi \rangle = \psi(x)\;, \tag{281}$$

ami tehát nem más, mint a ψ függvény x helyen felvett értéke. Nyilván most a

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle\langle x|\psi\rangle\,dx \tag{282}$$

átírás formális, mert a $|x\rangle \in L^2(\mathbb{R})$ nem létezik, de ezt helyettesíthetjük a

$$\langle\psi| = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|\psi\rangle^* \langle x|\,dx \tag{283}$$

kifejtéssel, ahol $\langle\psi|$, $\langle x| \in L^2(\mathbb{R})^*$ és $\langle x|\psi\rangle^* = \psi^*(x)$. A $\langle\psi|$ reguláris disztribúció hatása a Riesz reprezentációs tételnek megfelelően a skalárszorzat,

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|\psi\rangle^* \langle x|\varphi\rangle\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\,\varphi(x)\;dx \quad \forall\varphi \in L^2(\mathbb{R})\;. \tag{284}$$

Egy $\hat{O} : L^2(\mathbb{R}) \to L^2(\mathbb{R})$ lineáris operátort az

$$\langle x|\hat{O}\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|\hat{O}x'\rangle\langle x'|\psi\rangle\,dx'\,, \tag{285}$$

illetve a

$$\left(\hat{O}\psi\right)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} O(x, x')\,\psi(x')\;dx' \tag{286}$$

összefüggéssel ábrázolunk. Az $\hat{x}$ operátor ábrázolása:

$$(\hat{x}\psi)(x') = \int_{-\infty}^{\infty} x(x', x'')\,\psi(x'')\;dx'' = x'\psi(x') \tag{287}$$

azaz

$$x\left(x',x''\right)=x'\delta\left(x'-x''\right)\,. \tag{288}$$

Ebből következik, hogy bármely $\hat{f}$ multiplikatív operátor ábrázolása,

$$f\left(x,x'\right)=f\left(x\right)\delta\left(x-x'\right)\,. \tag{289}$$

A $\hat{p}$ operátor ábrázolása:

$$\left(\hat{p}\psi\right)\left(x\right)=\int_{-\infty}^{\infty}p\left(x,x'\right)\psi\left(x'\right)\,dx'=\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi\left(x\right)\,, \tag{290}$$

tehát

$$p\left(x,x'\right)=\delta\left(x-x'\right)\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx'} \tag{291}$$

és így a kinetikus energia operátort a

$$K\left(x,x'\right)=\delta\left(x-x'\right)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx'^2}\right) \tag{292}$$

kifejezés ábrázolja. Látható, hogy mindegyik operátor koordináta ábrázolása diagonális (nemlokális potenciálokkal most nem foglalkozunk), így az absztrakt Schrödinger-egyenlet,

$$i\hbar\partial_t|\psi\left(t\right)\rangle=H\left(t\right)|\psi\left(t\right)\rangle \tag{293}$$

koordináta reprezentációban ekvivalens a hullámmechanika

$$i\hbar\partial_t\psi\left(x,t\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi\left(x,t\right)}{dx^2}+V\left(x,t\right)\psi\left(x,t\right) \tag{294}$$

differenciálegyenletével. A fentiek általánosítása $L^2\left(\mathbb{R}^d\right)$ Hilbert-térre triviális, mivel

$$\delta\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)=\delta\left(x_1-x_1'\right)\delta\left(x_2-x_2'\right)\ldots\delta\left(x_d-x_d'\right)\,. \tag{295}$$

6.8. Az impulzus operátor spektruma, impulzus reprezentáció

Az impulzus operátor sajátérték egyenlete koordináta reprezentációban,

$$\left(\hat{p}\varphi_p\right)\left(x\right)=\frac{\hbar}{i}\frac{d\varphi_p\left(x\right)}{dx}=p\varphi_p\left(x\right) \tag{296}$$

melynek minden $p\in\mathbb{R}$ esetén van megoldása,

$$\varphi_p\left(x\right)=Ae^{i\frac{p}{\hbar}x}\,. \tag{297}$$

Mint korábban megállapítottuk, $\varphi_p\notin L^2\left(\mathbb{R}\right)$, hiszen $\langle\varphi_p|\varphi_p\rangle$ nem véges. Így a φ_p függvényt ismételten disztribúcióként értelmezzük,

$$\langle\varphi_p|\psi\rangle=A^*\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\frac{p}{\hbar}x}\,\psi\left(x\right)\,dx\,. \tag{298}$$

Az A konstans rögzítéséhez felhasználjuk, hogy a

$$\tilde{\psi}\left(k\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ikx}\,\psi\left(x\right)\,dx \tag{299}$$

Fourier transzformáció unitér (Parseval-Plancherel tétel),

$$\langle\tilde{\psi}_1|\tilde{\psi}_2\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\psi}_1^*(k)\,\tilde{\psi}_2(k)\,dk = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*(x)\,\psi_2(x)\,dx = \langle\psi_1|\psi_2\rangle\,. \tag{300}$$

Ezek alapján $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \frac{1}{\sqrt{h}}$, tehát

$$\varphi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{h}}e^{i\frac{p}{\hbar}x}\,. \tag{301}$$

A delta-disztribúcióhoz hasonlóan a φ_p disztribúciót is kifejezhetjük reguláris (négyzetesen integrálható) függvények sorozatának határértekeként:

$$\varphi_p(x) = \lim_{n\to\infty}\chi_n(x) \qquad \chi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{h}}e^{i\frac{p}{\hbar}x - x^2/4n^2}\,. \tag{302}$$

Nyilvánvalóan fennáll, hogy

$$\lim_{n\to\infty}\hat{p}\chi_n(x) = \lim_{n\to\infty}\left(p - \frac{\hbar}{i}\frac{x}{2n^2}\right)\chi_n(x) = p\lim_{n\to\infty}\chi_n(x)\,. \tag{303}$$

A φ_p általánosított sajátfüggvények teljességét kifejező összefüggés,

$$\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_p^*(x)\,\varphi_p(x')\,dp = \frac{1}{h}\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\frac{p}{\hbar}(x'-x)}dp = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ik(x'-x)}dk = \delta(x-x')\,. \tag{304}$$

A p és x koordináták szerepének felcserélésével,

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_p^*(x)\,\varphi_{p'}(x)\,dx &= \frac{1}{h}\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\frac{p'-p}{\hbar}x}dx = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ix(k'-k)}dx = \frac{1}{\hbar}\delta(k-k')\\ &= \delta(p-p')\,,\end{aligned} \tag{305}$$

ami a φ_p függvények Dirac-delta normálását jelenti.

A hullámfüggvényt tehát reprezentálhatjuk a φ_p függvények szerint,

$$\tilde{\psi}(p) \equiv \langle\varphi_p|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{h}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\frac{p}{\hbar}x}\,\psi(x)\,dx\,, \tag{306}$$

amit *impulzus reprezentáció*nak nevezünk.

Nézzük meg a nevezetes operátorok hatását impulzus reprezentációban! A $\hat{p}$ operátor hatása,

$$\begin{aligned}\left(\hat{p}\tilde{\psi}\right)(p) &= \langle\varphi_p|\hat{p}\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{h}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\frac{p}{\hbar}x}\,\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi(x)}{dx}\,dx\\ &= \frac{1}{\sqrt{h}}\frac{\hbar}{i}\underbrace{\left[e^{-i\frac{p}{\hbar}x}\,\psi(x)\right]_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - \frac{1}{\sqrt{h}}\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d}{dx}\left(e^{-i\frac{p}{\hbar}x}\right)\psi(x)\,dx\\ &= p\frac{1}{\sqrt{h}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\frac{p}{\hbar}x}\psi(x)\,dx = p\,\tilde{\psi}(p)\,.\end{aligned} \tag{307}$$

A $\hat{p}$ operátor impulzus reprezentációban tehát úgy hat, mint az $\hat{x}$ operátor koordináta reprezentációban. Innen a kinetikus energia operátorának hatása is egyszerűen kifejezhető,

$$\left(\hat{K}\tilde{\psi}\right)(p) = \frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(p)\,. \tag{308}$$

Az $\hat{x}$ operátor hatása,

$$\left(\hat{x}\tilde{\psi}\right)(p) = \langle\varphi_p|\hat{x}\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{h}}\int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{e^{-i\frac{p}{\hbar}x}x}_{=i\hbar\frac{d}{dp}e^{-i\frac{p}{\hbar}x}} \psi(x)\, dx$$

$$= i\hbar\frac{1}{\sqrt{h}}\frac{d}{dp}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{p}{\hbar}x}\,\psi(x)\, dx = i\hbar\frac{d\tilde{\psi}(p)}{dp}\,. \tag{309}$$

ami ellentétes előjellel szinonim kfejezés a $\hat{p}$ operátor hatásával koordináta reprezentációban. Vizsgáljuk meg a $\hat{p}$ és $\hat{x}$ operátorok csererelációját:

$$[\hat{p},\hat{x}]\,\tilde{\psi}(p) = i\hbar p\frac{d\tilde{\psi}(p)}{dp} - i\hbar\frac{d\left(p\tilde{\psi}(p)\right)}{dp} = -i\hbar\tilde{\psi}(p) \tag{310}$$

tehát impulzus reprezentációban is teljesül a

$$[\hat{p},\hat{x}] = \frac{\hbar}{i} \tag{311}$$

cserereláció.

Ha a potenciális energia analitikus függvény x-ben, $V(x) = \sum_n c_n x^n$, akkor

$$\left(\hat{V}\psi\right)(x) = (\sum_n c_n\hat{x}^n\psi)(x) \tag{312}$$

és impulzus reprezentációban

$$\left(\hat{V}\tilde{\psi}\right)(p) = \sum_n c_n(i\hbar\frac{d}{dp})^n\tilde{\psi}(p) = V(i\hbar\frac{d}{dp})\tilde{\psi}(p)\ . \tag{313}$$

Mivel minden operátorunk diagonális (lokális) az impulzus reprezentációban is, az időfüggő Schrödinger-egyenlet

$$i\hbar\partial_t\tilde{\psi}(p,t) = \frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(p,t) + V(i\hbar\frac{d}{dp},t)\tilde{\psi}(p,t)\ , \tag{314}$$

az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet pedig

$$\frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(p) + V(i\hbar\frac{d}{dp})\tilde{\psi}(p) = E\tilde{\psi}(p) \tag{315}$$

alakú lesz.

Tanulságos megvizsgálni impulzus reprezentációban a lineáris harmonikus oszcillátor Schrödinger-egyenletét,

$$\frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(p) + \frac{1}{2}m\omega^2(i\hbar)^2\frac{d^2\tilde{\psi}(p)}{dp^2} = E\tilde{\psi}(p)\ , \tag{316}$$

amit tovább alakítva

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\tilde{\psi}(p)}{dp^2} + \frac{p^2}{2m^3\omega^2}\tilde{\psi}(p) = \frac{E}{m^2\omega^2}\tilde{\psi}(p)\ , \tag{317}$$

és a

$$\tilde{\omega} = \frac{1}{m^2\omega}\,,\ \tilde{E} = \frac{E}{m^2\omega^2} \tag{318}$$

változók bevezetésével a

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\tilde{\psi}\,(p)}{dp^2}+\frac{1}{2}m\tilde{\omega}^2p^2\tilde{\psi}\,(p)=\tilde{E}\tilde{\psi}\,(p)$$

egyenlethez jutunk. Ez formailag azonos a harmonikus oszcillátor koordinátatérbeli Schrödinger-egyenletével, bár az $\tilde{\omega}$ nem frekvencia és az $\tilde{E}$ nem energia dimenziójú mennyiségek. Az egyenlet megoldása az $\tilde{E}$ változóra,

$$\tilde{E}_n=\hbar\tilde{\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{319}$$

amiből az energiára az ismert

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{320}$$

összefüggés adódik.

7. Méréselmélet

Helymérés: Ha a részecske ψ állapotban van, annak valószínűsége, hogy a részecskét a $[x_1, x_2]$ intervallumban találjuk,

$$w(x_1, x_2) = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 \, dx \,, \tag{321}$$

amiből a megtalálási valószínűségsűrűség,

$$w(x, x+dx) = \rho(x) \, dx \tag{322}$$

$$\Downarrow$$

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 \,. \tag{323}$$

A helyoperátor általánosított sajátfüggvényével,

$$\widehat{x} \, |\delta_{x_0}\rangle = x_0 \, |\delta_{x_0}\rangle \iff \langle\delta_{x_0}| \, \widehat{x} = x_0 \, \langle\delta_{x_0}| \;, \tag{324}$$

$$\langle\delta_{x_0}|\psi\rangle = \psi(x_0) \;, \tag{325}$$

a megtalálási valószínűségsűrűség kifejezhető a

$$\rho(x) = |\, \langle\delta_x|\psi\rangle \,|^2 \;, \tag{326}$$

alakban, a helymérés átlaga pedig

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \, w(x, x+dx) = \int_{-\infty}^{\infty} x \, \rho(x) \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} x \, |\, \langle\delta_x|\psi\rangle \,|^2 dx \,. \tag{327}$$

Hasonló összefüggéseket írhatunk az impulzus mérésére is. Az első Ehrenfest tétel alapján az impulzus mérési középértéke a ψ állapotban:

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi^*(x) \, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) \;, \tag{328}$$

amit átírhatunk a

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \, e^{\frac{i}{\hbar} px} \, \tilde{\psi}(p) \tag{329}$$

összefüggés alapján:

$$\begin{aligned}
\langle p\rangle &= \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, [\int_{-\infty}^{\infty} dp \, e^{-\frac{i}{\hbar} px} \tilde{\psi}^*(p)] \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} [\int_{-\infty}^{\infty} dp' \, e^{\frac{i}{\hbar} p'x} \tilde{\psi}(p')] \\
&= \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, [\int_{-\infty}^{\infty} dp \, e^{-\frac{i}{\hbar} px} \tilde{\psi}^*(p)] [\int_{-\infty}^{\infty} dp' \, p' e^{\frac{i}{\hbar} p'x} \tilde{\psi}(p')] \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp \, dp' \, \underbrace{[\frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dx \,' e^{\frac{i}{\hbar}(p'-p)x}]}_{=\delta(p-p')} p' \tilde{\psi}^*(p) \, \tilde{\psi}(p') \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dp \, p \left|\tilde{\psi}(p)\right|^2 .
\end{aligned} \tag{330}$$

Nyilvánvaló tehát, hogy az impulzustérbeli megtalálási valószínűségsűrűség kifejezése analóg a valós térbeli megtalálási valószínűségsűrűséggel,

$$\rho(p) = |\tilde{\psi}(p)\,|^2 \tag{331}$$

$$\Downarrow$$

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p\,\rho\,(p)\,dp = \int_{-\infty}^{\infty} p\,|\,\langle\varphi_p|\psi\rangle\,|^2\,dp\,, \tag{332}$$

és annak valószínűsége, hogy a részecske impulzusa $[p_1, p_2]$ intervallumba esik,

$$w\,(p_1,p_2) = \int_{p_1}^{p_2} dp\,|\tilde{\psi}\,(p)\,|^2 = \int_{p_1}^{p_2} dp\,|\,\langle\varphi_p|\psi\rangle\,|^2\,. \tag{333}$$

7.1. A fizikai mérés alapelvei

A fentieket a következőképpen általánosíthatjuk diszkrét spektrumú operátorokra (a továbbiakban az operátorokról elhagyjuk a 'kalap' jelölést):

1) Az O dinamikai mennyiséget mérő kvantummechanikai mérőeszköz (szeparátor) a ψ hullámfüggvényt az O operátor sajátállapotais szerint válogatja szét (*hullámfüggvény redukció*). A mérési eredmény ezért mindig az O operátor valamely sajátértéke lesz.

2) Egy dinamikai mennyiség operátorának sajátállapotában (*tiszta állapot*) a mérési eredmény az operátor megfelelő sajátértéke

$$O\,|\varphi\rangle = o\,|\varphi\rangle \Longrightarrow \langle O\rangle_\varphi = o \tag{334}$$

3) Ha a rendszer az O operátor sajátállapotainak szuperpozíciója (*szuperponált állapot*),

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n\,|\varphi_n\rangle \tag{335}$$

ahol $O\,|\varphi_n\rangle = o_n\,|\varphi_n\rangle$ és

$$c_n = \langle\varphi_n|\psi\rangle\ , \tag{336}$$

akkor annak valószínűsége, hogy a mérés o_n értéket ad

$$p_n = |c_n|^2 = \langle\varphi_n|\psi\rangle\,\langle\psi|\varphi_n\rangle\ . \tag{337}$$

Nyilvánvaló, hogy a teljes mérési valószínűség

$$\sum_n p_n = \sum_n |c_n|^2 = \sum_n \langle\psi|\varphi_n\rangle\,\langle\varphi_n|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1\ . \tag{338}$$

4) Következmény: Az o megfigyelhető fizikai mennyiség mérésének átlaga a $|\psi\rangle$ szuperponált állapotban:

$$\langle O\rangle_\psi = \sum_n p_n o_n = \sum_n |c_n|^2\,o_n = \sum_n \langle\psi|\varphi_n\rangle\,\langle\varphi_n|\psi\rangle\ o_n \tag{339}$$

$$= \langle\psi|\left(\sum_n o_n\,|\varphi_n\rangle\,\langle\varphi_n|\right)|\psi\rangle = \langle\psi|\,O\,|\psi\rangle \tag{340}$$

azaz *a kvantummechanikai átlagérték megegyezik a mérési átlaggal.*

7.2. A mérési eredmény időfüggése

Deriváljuk az idő szerint a

$$\langle O\rangle = \langle\psi(t)|\,O\,|\psi(t)\rangle \tag{341}$$

kvantummechanikai átlagot:

$$\begin{aligned}\frac{d\langle O\rangle}{dt} &= \langle\partial_t\psi(t)|\,O\,|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\,O|\partial_t\psi(t)\rangle \\ &= -\frac{1}{i\hbar}\langle H\psi(t)|\,O\,|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|\,O\,|H\psi(t)\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar}\left(\langle\psi(t)\,|OH\psi(t)\rangle - \langle\psi(t)\,|HO\psi(t)\rangle\right) \\ &= \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)\,|\,(OH-HO)\,\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)\,|\,[O,H]\,\psi(t)\rangle\end{aligned} \tag{342}$$

ahol az O operátor esetleges explicit időfüggésétől eltekintettünk. Bevezetve az O operátor *kvantummechanikai időderiváltját,*

$$\frac{dO}{dt} \equiv \frac{1}{i\hbar}[O,H] \tag{343}$$

a kvantummechanikai (mérési) átlag idő szerinti deriváltjára a

$$\frac{d\langle O\rangle}{dt} = \langle\psi(t)|\,\frac{dO}{dt}\,|\psi(t)\rangle \tag{344}$$

összefüggést kapjuk. Ennek jelentősége az, hogy a mérési átlag időderiváltjának kiszámításához nem kell kiszámítanunk a hullámfüggvény időderiváltját.

Következmények:

(1) Az O fizikai mennyiség *mozgásállandó*, ha $[O,H]=0$.

(2) Ehrenfest tételek:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V \tag{345}$$

$$\begin{aligned}\frac{dx_i}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[x_i,H] = \frac{1}{2i\hbar m}\left[x_i,p_i^2\right] = \frac{1}{2i\hbar m}\left([x_i,p_i]\,p_i + p_i\,[x_i,p_i]\right) \\ &= \frac{1}{2i\hbar m}2i\hbar p_i = \frac{p_i}{m}\end{aligned} \tag{346}$$

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[p_i,H] = \frac{1}{i\hbar}[p_i,V] = \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{\hbar}{i}\partial_i, V\right] = -\partial_i V = F_i\,. \tag{347}$$

7.3. Határozatlansági relációk

A mérési eredmény szórása (standard eltérés):

$$(\Delta O)^2 = \sigma_o^2 = \left\langle (O-\langle O\rangle)^2\right\rangle = \sum_n p_n\,(o_n - \langle O\rangle)^2 \tag{348}$$

$$= \sum_n |c_n|^2\,(o_n-\langle O\rangle)^2 = \sum_n \langle\psi|\varphi_n\rangle\,(o_n-\langle O\rangle)^2\,\langle\varphi_n|\psi\rangle \tag{349}$$

$$= \langle\psi|\left(\sum_n (o_n-\langle O\rangle)^2\,|\varphi_n\rangle\,\langle\varphi_n|\right)|\psi\rangle = \langle\psi|\,(O-\langle O\rangle)^2\,|\psi\rangle\;. \tag{350}$$

Megjegyzés:

$$(\Delta O)^2 = \langle\psi| O^2 |\psi\rangle - \langle\psi| O |\psi\rangle^2 \ . \tag{351}$$

1) Sajátállapotban a szórás zérus, azaz a mérés determinisztikus:

$$\langle O\rangle_{\varphi_n} = o_n \tag{352}$$

$$\left\langle O^2\right\rangle_{\varphi_n} = \langle\varphi_n| O^2 |\varphi_n\rangle = o_n^2 \tag{353}$$

$$(\Delta O)^2_{\varphi_n} = \left\langle O^2\right\rangle_{\varphi_n} - \langle O\rangle^2_{\varphi_n} = 0 \tag{354}$$

2) Szuperponált állapotban a szórás véges: $(\Delta O)^2_\psi > 0$

Példa:

$$|\psi\rangle = c_1 |\varphi_1\rangle + c_2 |\varphi_2\rangle \tag{355}$$

$$O |\varphi_1\rangle = o_1 |\varphi_1\rangle \ , \ O |\varphi_2\rangle = o_1 |\varphi_2\rangle \ , \ \langle\varphi_1|\varphi_2\rangle = 0$$

$$c_1, c_2 \neq 0, \ |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$$

$$\Downarrow$$

$$\langle O\rangle = \langle\psi| O |\psi\rangle = |c_1|^2 o_1 + |c_2|^2 o_2 \tag{356}$$

$$o_1 - \langle O\rangle = |c_2|^2 (o_1 - o_2) \tag{357}$$

$$o_2 - \langle O\rangle = |c_1|^2 (o_2 - o_1) \tag{358}$$

$$(\Delta O)^2_\psi = |c_1|^2 (o_1 - \langle O\rangle)^2 + |c_2|^2 (o_2 - \langle O\rangle)^2 \tag{359}$$

$$= \left(|c_1|^2 |c_2|^4 + |c_1|^4 |c_2|^2\right) (o_1 - o_2)^2 \tag{360}$$

$$= |c_1|^2 |c_2|^2 (o_1 - o_2)^2 \tag{361}$$

Világos, hogy $(\Delta O)^2_\psi$ csak abban az esetben zérus, ha $o_1 = o_2$, azaz φ_1 és φ_2 egy degenerált sajátértékhez tartozó sajátállapotok.

7.3.1. Heisenberg-féle határozatlansági reláció

Legyen A és B két megfigyelhető fizikai mennyiség operátora és $C = [A, B] \neq 0$. Ekkor a rendszer bármely állapotában:

$$\Delta A \, \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle C\rangle| \tag{362}$$

Megjegyzés: A tétel szerint, amennyiben méréssorozatot végzünk ugyanazon ψ állapotban (preparált állapot) az A és B megfigyelhető mennyiségekre, akkor ezen mérések mindegyike nem végezhető el tetszőleges pontossággal, illetve csak abban az esetben, ha $\langle\psi| [A, B] |\psi\rangle = 0$.

Mivel $[p_x, x] = \frac{\hbar}{i} \Longrightarrow \Delta p_x \, \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$, azaz egy részecske valamely helykoordinátája és ezen irányú impulzusa semmilyen állapotban sem mérhető 'egyszerre' tetszőleges pontossággal.

Bizonyítás: Legyen $A' = A - \langle A\rangle$ és $B' = B - \langle B\rangle$, valamint $|f\rangle = A' |\psi\rangle$ és $|g\rangle = B' |\psi\rangle$. Ekkor

$$(\Delta A)^2 = \langle f|f\rangle \ , \ (\Delta B)^2 = \langle g|g\rangle \tag{363}$$

$$\Downarrow$$

$$
\begin{aligned}
(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 &= \langle f|f\rangle \langle g|g\rangle \geq |\langle f|g\rangle|^2 = |\langle\psi| A'B' |\psi\rangle|^2 \\
&= \left|\langle\psi| \frac{1}{2}(A'B' - B'A') + \frac{1}{2}(A'B' + B'A') |\psi\rangle\right|^2 \\
&= \left|\langle\psi| \frac{1}{2}(A'B' - B'A') |\psi\rangle\right|^2 + \left|\langle\psi| \frac{1}{2}(A'B' + B'A') |\psi\rangle\right|^2 \\
&+ \langle\psi| \frac{1}{2}(A'B' - B'A') |\psi\rangle^* \langle\psi| \frac{1}{2}(A'B' + B'A') |\psi\rangle \\
&+ \langle\psi| \frac{1}{2}(A'B' - B'A') |\psi\rangle \langle\psi| \frac{1}{2}(A'B' + B'A') |\psi\rangle^* \qquad (364)
\end{aligned}
$$

Mivel $A'B' + B'A'$ hermitikus,

$$
\langle\psi| \frac{1}{2}(A'B' + B'A') |\psi\rangle = \langle\psi| \frac{1}{2}(A'B' + B'A') |\psi\rangle^* \qquad (365)
$$

és $(A'B' - B'A')^+ = -(A'B' - B'A')$

$$
\langle\psi| \frac{1}{2}(A'B' - B'A') |\psi\rangle = -\langle\psi| \frac{1}{2}(A'B' - B'A') |\psi\rangle^* , \qquad (366)
$$

az utolsó két tag kiejti egymást. Továbbá

$$
|\langle\psi| \frac{1}{2}(A'B' + B'A') |\psi\rangle|^2 \geq 0 \qquad (367)
$$

ezért

$$
(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq |\langle\psi| \frac{1}{2}(A'B' - B'A') |\psi\rangle|^2 . \qquad (368)
$$

Végezetül

$$
A'B' - B'A' = [A - \langle A\rangle , B - \langle B\rangle] = [A, B] = C \qquad (369)
$$

így ezzel a tételt bizonyítottuk.

7.3.2. A hely-impulzus határozatlanság hullámcsomag esetén

A helyoperátor sajátállapotában $\Delta x = 0$. Ez az állapot impulzus reprezentációban,

$$
\tilde{\delta}(p) = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(x - x_0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px} = \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}px_0}}{\sqrt{h}} . \qquad (370)
$$

melyben az impulzus várhatóértéke,

$$
\langle p\rangle = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{\frac{i}{\hbar}px_0} p e^{-\frac{i}{\hbar}px_0} = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dp\, p = 0 , \qquad (371)
$$

viszont az impulzus mérése

$$
(\Delta p)^2 = \langle p^2\rangle = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dp\, e^{\frac{i}{\hbar}px_0} p^2 e^{-\frac{i}{\hbar}px_0} = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dp\, p^2 = \infty \qquad (372)
$$

miatt teljesen határozatlan.

Belátható, hogy a

$$
\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \tilde{\psi}(p)\, e^{\frac{i}{\hbar}px} \qquad (373)
$$

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{e^{-(p-p_0)^2/4\sigma^2}}{\sigma^{\frac{1}{2}}(2\pi)^{\frac{1}{4}}} \tag{374}$$

hullámcsomag állapotban,

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, p\, \tilde{\psi}^2(p) = p_0 \tag{375}$$

és

$$(\Delta p)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, p^2\, \tilde{\psi}^2(p) = \sigma^2\ . \tag{376}$$

Ugyanis

$$\begin{aligned}
\langle p \rangle &= \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dppe^{-(p-p_0)^2/2\sigma^2} \\
&= \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}(p_0 \int_{-\infty}^{\infty} dpe^{-(p-p_0)^2/2\sigma^2} + \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dp\,(p-p_0)\, e^{-(p-p_0)^2/2\sigma^2})}_{=0} \\
&= \frac{p_0}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dpe^{-p^2/2\sigma^2} = \frac{p_0}{\sigma\sqrt{2\pi}}\sqrt{2}\sigma \int_{-\infty}^{\infty} dte^{-t^2}
\end{aligned}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dte^{-t^2} = 2\int_{0}^{\infty} dte^{-t^2} = \int_{0}^{\infty} dy\, \frac{1}{\sqrt{y}} e^{-y} = \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$$

$$\Downarrow$$

$$\langle p \rangle = \frac{p_0}{\sigma\sqrt{2\pi}}\sigma\sqrt{2\pi} = p_0$$

és

$$\left\langle (p-p_0)^2 \right\rangle = \frac{1}{\sigma\,(2\pi)^{\frac{1}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dp\,(p-p_0)^2\, e^{-(p-p_0)^2/2\sigma^2} = \frac{2\sigma^2}{\pi^{\frac{1}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, t^2 e^{-t^2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt\, t^2 e^{-t^2} = 2\int_{0}^{\infty} dt\, t^2 e^{-t^2} = \int_{0}^{\infty} dy\, \sqrt{y} e^{-y} = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$\Downarrow$$

$$\left\langle (p-p_0)^2 \right\rangle = \sigma^2$$

A hullámcsomag állapotfüggvény koordináta reprezentációban,

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \frac{1}{\sigma^{\frac{1}{2}}(2\pi)^{\frac{1}{4}}\, h^{\frac{1}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dpe^{-(p-p_0)^2/4\sigma^2} e^{\frac{i}{\hbar}px} \\
&= \frac{e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x}}{\sigma^{\frac{1}{2}}(2\pi)^{\frac{1}{4}}\, h^{\frac{1}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dpe^{-p^2/4\sigma^2} e^{\frac{i}{\hbar}px}\ .
\end{aligned} \tag{377}$$

Felhasználva, hogy

$$\int_{-\infty}^{\infty} ds\, e^{-as^2+2bs} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{a}}$$

$$a = \frac{1}{4\sigma^2},\ b = \frac{i}{2\hbar}x \Longrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dpe^{-p^2/4\sigma^2} e^{\frac{i}{\hbar}px} = 2\sigma\sqrt{\pi} e^{-\frac{x^2\sigma^2}{\hbar^2}}$$

a hullámfüggvényre a

$$
\begin{aligned}
\psi\left(x\right) &= \frac{2\sigma\sqrt{\pi}}{\sigma^{\frac{1}{2}}\left(2\pi\right)^{\frac{1}{4}}h^{\frac{1}{2}}}e^{-\frac{x^2\sigma^2}{\hbar^2}}e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x} \\
&= \frac{\left(2\sigma\right)^{\frac{1}{2}}}{\left(2\pi\right)^{\frac{1}{4}}\hbar^{\frac{1}{2}}}e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x-\frac{x^2\sigma^2}{\hbar^2}}\ , \qquad (378)
\end{aligned}
$$

kifejezést kapjuk, amiből a valószínűségsűrűség

$$
\left|\psi\left(x\right)\right|^2 = \frac{2\sigma}{\left(2\pi\right)^{\frac{1}{2}}\hbar}e^{-\frac{2x^2\sigma^2}{\hbar^2}}\ . \qquad (379)
$$

A helymérés átlaga,

$$
\langle x\rangle = \frac{2\sigma}{\left(2\pi\right)^{\frac{1}{2}}\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dx\,x\,e^{-\frac{2x^2\sigma^2}{\hbar^2}} = 0 \qquad (380)
$$

és szórása

$$
\begin{aligned}
\left(\Delta x\right)^2 &= \frac{2\sigma}{\left(2\pi\right)^{\frac{1}{2}}\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dx\,x^2\,e^{-\frac{2x^2\sigma^2}{\hbar^2}} = \frac{4\sigma}{\left(2\pi\right)^{\frac{1}{2}}\hbar}\int_{0}^{\infty}dx\,x^2\,e^{-\frac{2x^2\sigma^2}{\hbar^2}} \\
&\underset{t=\frac{\sqrt{2}x\sigma}{\hbar}}{=} \frac{\hbar^3}{2^{\frac{3}{2}}\sigma^3}\frac{4\sigma}{\left(2\pi\right)^{\frac{1}{2}}\hbar}\int_{0}^{\infty}dt\,t^2\,e^{-t^2} \\
&= \frac{\hbar^3}{2^{\frac{3}{2}}\sigma^3}\frac{4\sigma}{\left(2\pi\right)^{\frac{1}{2}}\hbar}\frac{\sqrt{\pi}}{4} = \frac{\hbar^2}{2^2\sigma^2} \qquad (381)
\end{aligned}
$$

$$
\Downarrow
$$

$$
\Delta x = \frac{\hbar}{2\sigma}\ . \qquad (382)
$$

Innen következik, hogy a hullámcsomagra

$$
\Delta x\,\Delta p = \frac{\hbar}{2} \qquad (383)
$$

azaz a hely és impulzus mérés szórásának szorzata a Heisenberg-féle határozatlansági reláció alsó határán van.

8. Impulzusmomentum operátorok

8.1. Definíciók és felcserélési relációk

A tömegpont impulzusmomentumának (perdületének) definícója a klasszikus mechanikában:

$$\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p} \tag{384}$$

vagy

$$L_i = \varepsilon_{ijk}\, x_j\, p_k \qquad (i,j,k = x,y,z) \quad . \tag{385}$$

A kvantummechanikában a fenti definíciót megtartva, a megfelelő operátorokat helyettesítjük be. (Az órán tárgyaltuk a perdületoperátor bevezetését a térbeli forgatásokon keresztül.) Vizsgáljuk meg az egyes komponensek felcserélési relációit:

$$[L_i, L_j] = \varepsilon_{ikl}\, \varepsilon_{jnm}\, [x_k\, p_l\, , x_n\, p_m] \quad .$$

Kihasználva az

$$[AB, C] = A\,[B, C] + [A, C]\,B$$

operátor azonosságot,

$$\begin{aligned}
[x_k\, p_l\, , x_n\, p_m] &= x_k\,[p_l\, , x_n\, p_m] + [x_k, x_n\, p_m]\; p_l = x_k\,[p_l\, , x_n]\; p_m + x_n\,[x_k,\, p_m]\; p_l \\
&= \frac{\hbar}{i}\,(\delta_{nl}\, x_k\, p_m - \delta_{mk}\, x_n\, p_l)
\end{aligned}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{aligned}
[L_i, L_j] &= \frac{\hbar}{i}\; \varepsilon_{ikl}\, \varepsilon_{jnm}\; (\delta_{nl}\, x_k\, p_m - \delta_{mk}\, x_n\, p_l) \\
&= \frac{\hbar}{i}\; (\varepsilon_{ikn}\, \varepsilon_{jnm}\; x_k\, p_m - \varepsilon_{iml}\, \varepsilon_{jnm}\, x_n\, p_l) \\
&= \frac{\hbar}{i}\; (\varepsilon_{ilm}\, \varepsilon_{jnm}\, x_n\, p_l - \; \varepsilon_{ikn}\, \varepsilon_{jmn}\; x_k\, p_m) \\
&= \frac{\hbar}{i}\; ([\delta_{ij}\, \delta_{nl} - \delta_{in}\, \delta_{jl}]\; x_n\, p_l - [\delta_{ij}\, \delta_{km} - \delta_{im}\, \delta_{jk}]\; x_k\, p_m) \\
&= \frac{\hbar}{i}\; (\delta_{ij}\, x_n\, p_n - x_i\, p_j - \delta_{ij}\, x_k\, p_k + x_j\, p_i) \\
&= i\hbar\; (x_i\, p_j - x_j\, p_i) \quad .
\end{aligned} \tag{386}$$

A független felcserélési relációkat explicit kiírva:

$$[L_x, L_y] = i\hbar\; (x\, p_y - y\, p_x)\; = i\hbar\, L_z \tag{387}$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar\; (z\, p_y - y\, p_z)\; = i\hbar\, L_x \tag{388}$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar\; (z\, p_x - x\, p_z)\; = i\hbar\, L_y \tag{389}$$

A fenti eredményeket másképpen is összefoglalhatjuk:

$$[L_i, L_j] = i\hbar\, \varepsilon_{ijk}\, L_k \quad , \tag{390}$$

hiszen

$$\varepsilon_{ijk}\, L_k = \varepsilon_{ijk}\, \varepsilon_{klm}\, x_l\, p_m = x_i\, p_j - x_j\, p_i \quad .$$

Következésképpen

$$\begin{aligned}\varepsilon_{kij}\,[L_i,L_j] &= i\hbar\,\varepsilon_{kij}\,\varepsilon_{ijm}\,L_m = i\hbar\,(\delta_{mk}\,\delta_{ii}-\delta_{mi}\,\delta_{ki})\,L_m \\ &= i\hbar\,(3\,L_k - L_k)\; = 2i\hbar\,L_k \quad .\end{aligned} \tag{391}$$

A fenti relációt a (386) egyenletből kiindulva egyszerűbben is megkaphatjuk, mivel

$$\varepsilon_{kij}\,[L_i,L_j] = i\hbar\,\varepsilon_{kij}\,(x_i\,p_j - x_j\,p_i)\; = 2i\hbar\,L_k \quad .$$

Innen azonnal következik, hogy

$$\underline{L}\times\underline{L} = i\hbar\,\underline{L} \quad . \tag{392}$$

A (390) vagy (392) relációkat kielégítő vektoroperátorok ún. *Lee-algebrát* alkotnak.

Következmény: Az L_i operátorok közös ψ sajátfüggvényeire fennáll, hogy $L_i\,\psi = 0$.

Bizonyítás: Tételezzük fel pl., hogy ψ L_x és L_y közös sajátfüggvénye,

$$L_x\,\psi = a\,\psi \quad , \quad L_y\,\psi = b\,\psi \qquad (\psi \neq 0)$$

Ekkor (387) egyenletből következik, hogy

$$L_z\,\psi = \frac{1}{i\hbar}\,(L_x\,L_y\,\psi - L_y\,L_x\,\psi) = 0 \quad .$$

Viszont akkor (388) alapján

$$L_x\,\psi = \frac{1}{i\hbar}\,(L_y\,L_z\,\psi - L_z\,L_y\,\psi) = 0 \quad ,$$

és ugyanígy, (389) alapján $L_y\,\psi = 0$, tehát $a = b = 0$.

Megjegyzés: Később látni fogjuk, hogy ezek a $\psi\,(r)$ alakú, radiális (gömbszimmetrikus) függvények.

Az L^2 operátort az

$$L^2 = L_iL_i = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \tag{393}$$

kifejezés definiálja.

Állítás: Az L^2 operátor kommutál L_i-vel ($i = x, y, z$).

Bizonyítás:

$$\begin{aligned}[L^2, L_i] &= [L_kL_k, L_i] = L_k[L_k, L_i] + [L_k, L_i]L_k \\ &= i\hbar\epsilon_{kij}\,(L_kL_j + L_jL_k) = i\hbar\,(\epsilon_{kij} + \epsilon_{jik})\,L_kL_j \; = 0 \quad .\end{aligned} \tag{394}$$

Következmény: Az L^2 és bármely L_i operátornak létezik közös sajátfüggvény rendszere.

8.2. Az L^2 és L_z operátorok sajátérték problémája a felcserélési relációk alapján

Vezessük be az

$$L_\pm \equiv L_x \pm iL_y \tag{395}$$

operátorokat, melyekre teljesülnek az alábbi felcserélési relációk:

$$\begin{aligned}[L_z, L_\pm] &= [L_z, L_x] \pm i[L_z, L_y] = i\hbar L_y \pm i(-i\hbar L_x) = i\hbar L_y \pm \hbar L_x = \pm\hbar(L_x \pm iL_y) \\ &= \pm\hbar L_\pm \,, \end{aligned} \tag{396}$$

$$[L_+, L_-] = [L_x + iL_y, L_x - iL_y] = -i[L_x, L_y] + i[L_y, L_x] \; = 2\hbar L_z \,, \tag{397}$$

és

$$[L^2, L_\pm] = [L^2, L_x] \pm i[L^2, L_y] \; = 0 \,. \tag{398}$$

Ezenkívül nyilvánvalóan fennáll, hogy

$$(L_\pm)^+ = L_\mp \quad , \tag{399}$$

tehát az $L_\pm$ operátorok nem hermitikusak. Fejezzük ki az L^2 operátort az $L_\pm$ és L_z operátorokkal:

$$\begin{aligned} L_+L_- &= (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) = L_x^2 + L_y^2 + i\underbrace{(L_yL_x - L_xL_y)}_{-i\hbar L_z} = L_x^2 + L_y^2 + \hbar L_z \\ &= L^2 - L_z^2 + \hbar L_z \end{aligned} \tag{400}$$

$$\begin{aligned} L_-L_+ &= (L_x - iL_y)(L_x + iL_y) = L_x^2 + L_y^2 - i\underbrace{(L_yL_x - L_xL_y)}_{-i\hbar L_z} = L_x^2 + L_y^2 - \hbar L_z \\ &= L^2 - L_z^2 - \hbar L_z \end{aligned} \tag{401}$$

$$\Downarrow$$

$$L_+L_- + L_-L_+ = 2\left(L_x^2 + L_y^2\right)$$

$$\Downarrow$$

$$L_x^2 + L_y^2 = \frac{1}{2}\left(L_+L_- + L_-L_+\right) \tag{402}$$

és

$$L^2 = \frac{1}{2}\left(L_+L_- + L_-L_+\right) + L_z^2 \quad . \tag{403}$$

Jelöljük L^2 és L_z közös sajátfüggvényeit $|\Lambda, \mu\rangle$-vel,

$$L^2 \, |\Lambda, \mu\rangle = \hbar^2 \Lambda \, |\Lambda, \mu\rangle \quad , \tag{404}$$

$$L_z \, |\Lambda, \mu\rangle = \hbar\mu \, |\Lambda, \mu\rangle \quad , \tag{405}$$

valamint

$$\langle \Lambda, \mu | \Lambda', \mu' \rangle = \delta_{\Lambda\Lambda'} \, \delta_{\mu\mu'} \quad . \tag{406}$$

Megjegyzés: Mivel az L_x és L_y operátorok is felcserélhetők L^2-tel, viszont L_z-vel nem, valamely rögzített Λ mellett, azok sajátfüggvényeit ki kell tudnunk keverni a $|\Lambda, \mu\rangle$ függvényekből. Következésképpen L^2 rögzített Λ-hoz tartozó sajátaltere az L_z sajátértékei ($\hbar\mu$) szerint elfajult. (A korábban belátott tétel szerint, ez alól csak a zérus sajátértékhez, $\mu = 0$, tartozó altér lehet kivétel.)

Mivel L^2 pozitív szemidefinit, $\Lambda \geq 0$. Továbbá,

$$\langle \Lambda, \mu | L_x^2 + L_y^2 | \Lambda, \mu \rangle = \langle \Lambda, \mu | L^2 - L_z^2 | \Lambda, \mu \rangle = \hbar^2 \left(\Lambda - \mu^2\right) \geq 0 \quad \longrightarrow \quad \mu^2 \leq \Lambda \quad . \tag{407}$$

Vizsgáljuk meg az $L_\pm$ operátorok hatását a $|\Lambda,\mu\rangle$ sajátfüggvényekre! A (396) csererereláció alapján:

$$\begin{aligned} L_z L_\pm |\Lambda,\mu\rangle &= [L_z, L_\pm]\,|\Lambda,\mu\rangle + L_\pm L_z |\Lambda,\mu\rangle = \pm\hbar\, L_\pm |\Lambda,\mu\rangle + \hbar\mu\, L_\pm |\Lambda,\mu\rangle \\ &= \hbar\,(\mu\pm 1)\; L_\pm |\Lambda,\mu\rangle \quad , \end{aligned} \tag{408}$$

azaz $L_\pm |\Lambda,\mu\rangle$ L_z-nek sajátfüggvénye $\hbar\,(\mu\pm 1)$ sajátértékkel. Ezért L_+-t *felfelé*, L_--t pedig *lefelé léptető* operátornak nevezzük. Mivel azonban $L_\pm$ kommutál L^2-tel, $L_\pm |\Lambda,\mu\rangle$ változatlan ($\hbar^2\Lambda$) sajátértékkel L^2 operátor sajátfüggvénye:

$$L_\pm |\Lambda,\mu\rangle = Q^\pm_{\Lambda,\mu} |\Lambda,\mu\pm 1\rangle \quad , \tag{409}$$

ahol $Q^\pm_{\Lambda,\mu}$ normálási faktorok, melyek között fennáll a következő összefüggés:

$$Q^+_{\Lambda,\mu} = \langle\Lambda,\mu+1|L_+|\Lambda,\mu\rangle = \langle\Lambda,\mu|L_-|\Lambda,\mu+1\rangle^* = (Q^-_{\Lambda,\mu+1})^* \quad , \tag{410}$$

ill. $Q^\pm_{\Lambda,\mu}$-kat valósnak választva,

$$Q_{\Lambda,\mu} \equiv Q^+_{\Lambda,\mu} = Q^-_{\Lambda,\mu+1} \quad . \tag{411}$$

Most határozzuk meg $Q_{\Lambda,\mu}$-t !

$$L_- L_+ |\Lambda,\mu\rangle = Q_{\Lambda,\mu}\, L_- |\Lambda,\mu+1\rangle = (Q_{\Lambda,\mu})^2\, |\Lambda,\mu\rangle \quad , \tag{412}$$

$$L_+ L_- |\Lambda,\mu\rangle = Q_{\Lambda,\mu-1}\, L_+ |\Lambda,\mu-1\rangle = (Q_{\Lambda,\mu-1})^2\, |\Lambda,\mu\rangle \quad . \tag{413}$$

Felhasználva a (400) és (401) azonosságokat:

$$(Q_{\Lambda,\mu})^2 = \hbar^2\left(\Lambda-\mu^2-\mu\right) \ge 0 \quad , \tag{414}$$

ill.

$$(Q_{\Lambda,\mu-1})^2 = \hbar^2\left(\Lambda-\mu^2+\mu\right) \ge 0 \quad , \tag{415}$$

a következő egyenlőtlenségeknek kell teljesülniük:

$$\left.\begin{array}{l} \Lambda \ge \mu\,(\mu+1) \\ \\ \Lambda \ge \mu\,(\mu-1) \end{array}\right\} \quad \longrightarrow \quad \Lambda \ge |\mu|\,(|\mu|+1) \quad , \tag{416}$$

és

$$Q_{\Lambda,\mu} = \hbar\sqrt{\Lambda-\mu\,(\mu+1)} \quad . \tag{417}$$

Mivel az L_+ operátor egymásutáni hattatásával egyre növekvő μ sajátértékű állapotba jutunk, nyilvánvalóan létezik olyan $\mu_{\max} > 0$, hogy $\mu^2_{\max} \le \Lambda < (\mu_{\max}+1)^2$. A (407) feltétel miatt azonban ilyen $\mu_{\max}+1$ sajátérték nem létezhet, így szükségszerűen

$$L_+ |\Lambda,\mu_{\max}\rangle = |\,\rangle_0 \,, \tag{418}$$

ahol $|\,\rangle_0$ a Hilbert tér nulleleme. A (401) egyenletből rögtön következik, hogy

$$\Lambda - \mu_{\max}\,(\mu_{\max}+1) = 0 \quad . \tag{419}$$

Hasonló meggondolással létezik olyan $\mu_{\min} < 0$, hogy $\mu^2_{\min} \le \Lambda < (\mu_{\min}-1)^2$. Ekkor

$$L_- |\Lambda,\mu_{\min}\rangle = |\,\rangle_0 \,, \tag{420}$$

és a (400) egyenletet alkalmazva

$$\Lambda - \mu_{\min}\,(\mu_{\min} - 1) \;= \Lambda - |\mu_{\min}|\,(|\mu_{\min}| + 1) = 0\,, \tag{421}$$

következik. A (419) és (421) feltételek összevetésével:

$$\mu_{\max}\,(\mu_{\max} + 1) - |\mu_{\min}|\,(|\mu_{\min}| + 1) = (\mu_{\max} - |\mu_{\min}|)\,(\mu_{\max} + |\mu_{\min}| + 1) = 0 \tag{422}$$

$$\Downarrow$$

$$\mu_{\max} = |\mu_{\min}| = j \quad , \tag{423}$$

és

$$\Lambda = j\,(j+1) \quad . \tag{424}$$

A szokványos terminológia alapján a $|\Lambda, \mu\rangle$ sajátállapotokat $|\,j, \mu\rangle$-vel jelöljük. Mivel a $|\,j, -j\rangle$ állapotból a $|\,j, j\rangle$ állapotba L_+-t hattatva egész számú lépésben jutunk el,

$$2j = 0, 1, 2, \ldots \quad \longrightarrow \quad \begin{cases} j = 0, 1, 2, \ldots \\ \\ j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots \end{cases} \quad . \tag{425}$$

Összefoglalva tehát, az L^2 és L_z impulzusmomentum operátorok közös sajátfüggvényrendszere:

$$\boxed{\begin{array}{c} L^2\,|\,j, \mu\rangle = \hbar^2\, j\,(j+1)\;|\,j, \mu\rangle \\ \\ L_z\,|\,j, \mu\rangle = \hbar\,\mu\;|\,j, \mu\rangle \\ \\ L_\pm\,|\,j, \mu\rangle = \hbar\,\sqrt{j\,(j+1) - \,\mu\,(\mu \pm 1)}\;|\,j, \mu \pm 1\rangle \end{array}}\,, \tag{426}$$

ahol

$$\boxed{j = 0, 1, 2, \ldots \quad \text{vagy} \quad j = \tfrac{1}{2}, \tfrac{3}{2}, \tfrac{5}{2}, \ldots} \tag{427}$$

és

$$\boxed{\mu = -j, -j+1, \ldots, \, j-1, \, j} \quad . \tag{428}$$

8.3. L_z sajátértékei és sajátfüggvényei

Írjuk fel a perdület operátor z-komponensét:

$$L_z = xp_y - yp_x = \frac{\hbar}{i}\left(x\partial_y - y\partial_x\right) \quad , \tag{429}$$

vagy gömbi polárkoordinátákkal,

$$x = r\sin\vartheta\cos\varphi \quad , \quad y = r\sin\vartheta\sin\varphi \quad , \quad z = r\cos\vartheta \quad ,$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i}\partial_\varphi \quad . \tag{430}$$

Bizonyítás:

$$\partial_\varphi = \frac{\partial x}{\partial\varphi}\partial_x + \frac{\partial y}{\partial\varphi}\partial_y + \frac{\partial z}{\partial\varphi}\partial_z = -y\partial_x + x\partial_y \quad .$$

Az L_z operátor hermiticitásának a

$$\begin{aligned}\langle\psi\,|L_z\phi\rangle &= \frac{\hbar}{i}\int_0^{2\pi}\psi\left(\varphi\right)^*\partial_\varphi\phi\left(\varphi\right) = \frac{\hbar}{i}\left[\psi\left(\varphi\right)^*\phi\left(\varphi\right)\right]_0^{2\pi} + \int_0^{2\pi}\left(\frac{\hbar}{i}\partial_\varphi\psi\left(\varphi\right)\right)^*\phi\left(\varphi\right) \\ &= \langle L_z\psi\,|\phi\rangle + \frac{\hbar}{i}\left[\psi\left(2\pi\right)^*\phi\left(2\pi\right) - \psi\left(0\right)^*\phi\left(0\right)\right] \quad ,\end{aligned} \tag{431}$$

összefüggés alapján az a feltétele, hogy bármely ψ és Φ függvényre

$$\frac{\psi\left(2\pi\right)}{\psi\left(0\right)}\left(\frac{\phi\left(2\pi\right)}{\phi\left(0\right)}\right)^* = 1 \quad .$$

így tetszőleges $\alpha \in \mathbb{R}$ számhoz definiálható egy $\mathcal{L}^2_\alpha\left[0, 2\pi\right] = \left\{\psi : \psi\left(2\pi\right) = e^{i\alpha}\psi\left(0\right)\right\}$ függvényhalmaz, melyek mindegyikén L_z hermitikus. A hullámfüggvény egyértékűségére vonatkozó axióma miatt a fizikai állapotokat az $\mathcal{L}^2_0\left[0, 2\pi\right] = \left\{\psi : \psi\left(2\pi\right) = \psi\left(0\right)\right\}$ halmazon keressük.

L_z sajátérték egyenlete,

$$L_z\psi\left(\varphi\right) = \frac{\hbar}{i}\partial_\varphi\psi\left(\varphi\right) = K\psi\left(\varphi\right) \quad , \tag{432}$$

mely normált megoldása

$$\psi\left(\varphi\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\frac{i}{\hbar}K\varphi} \quad . \tag{433}$$

Az egyértékűség következtében

$$\psi\left(\varphi\right) = \psi\left(\varphi + 2\pi\right) \quad \longrightarrow \quad \frac{K}{\hbar} = m \quad \longrightarrow \quad K = \hbar m \quad \left(m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots\right) \quad . \tag{434}$$

Azt kaptuk tehát, hogy a perdület z irányú komponense kvantált: $\hbar$ egész számszorosát veheti föl. Természetesen az x és y komponensekre is ezt mondhatjuk el, csupán a sajátfüggvények lesznek különbözőek.

8.4. A p^2 és az L^2 operátorok kapcsolata

Az L^2 operátor sajátérték problémájának megoldása előtt vizsgáljunk meg néhány alapvető összefüggést, mely a későbbiekben, nevezetesen a centrális potenciál Schrödinger egyenletének tárgyalásakor, is segítségünkre lesz.

$$
\begin{aligned}
L^2 &= L_i L_i = \varepsilon_{ijk}\,\varepsilon_{ilm}\,x_j\,p_k\,x_l\,p_m = (\delta_{jl}\,\delta_{km} - \delta_{jm}\,\delta_{kl})\,x_j\,p_k\,x_l\,p_m \\
&= x_j\,p_k\,x_j\,p_k - x_j\,p_k\,x_k\,p_j = x_j\left(x_j\,p_k + \frac{\hbar}{i}\delta_{kj}\right)p_k - x_j\,p_k\left(p_j\,x_k - \frac{\hbar}{i}\delta_{kj}\right) \\
&= r^2\,p^2 + 2\frac{\hbar}{i}\underline{r}\,\underline{p} - x_j\,p_j\,p_k\,x_k = r^2\,p^2 + 2\frac{\hbar}{i}\underline{r}\,\underline{p} - x_j\,p_j\,x_k\,p_k - 3\frac{\hbar}{i}x_j\,p_j \\
&= r^2\,p^2 - \left(\underline{r}\,\underline{p}\right)^2 - \frac{\hbar}{i}\underline{r}\,\underline{p} \quad .
\end{aligned}
\tag{435}
$$

A klasszikus mechanikában a fenti kifejezés utolsó tagja nem jelenik meg: az kizárólag az x és p operátorok felcserélési tulajdonságainak következménye. Az (435) egyenlet átalakításához a következő cserelációkat kell felhasználnunk:

$$
[L_i, x_k] = \varepsilon_{ilm}\,[x_l\,p_m, x_k] = \varepsilon_{ilm}\,x_l\,[p_m, x_k] = i\hbar\,\varepsilon_{ikl}\,x_l \quad , \tag{436}
$$

$$
[L_i, p_k] = \varepsilon_{ilm}\,[x_l\,p_m, p_k] = \varepsilon_{ilm}\,[x_l, p_k]\,p_m = i\hbar\,\varepsilon_{ikm}\,p_m \quad , \tag{437}
$$

melyekből

$$
\left[L_i, r^2\right] = [L_i, x_k x_k] = x_k\,[L_i, x_k] + [L_i, x_k]\,x_k = 2i\hbar\,\varepsilon_{ikl}\,x_k x_l = 2i\hbar\,(\underline{r}\times\underline{r})_i = 0\,, \tag{438}
$$

és teljesen hasonlóan

$$
\left[L_i, p^2\right] = 0\,, \tag{439}
$$

következik. Felhasználva, hogy

$$
\left[A, B^{-1}\right] = -B^{-1}\,[A, B]\,B^{-1} \quad ,
$$

adódik, hogy

$$
\left[L^2, \frac{1}{r^2}\right] = 0 \quad . \tag{440}
$$

Ezért értelmes az (435) egyenletet az alábbi módon átalakítani,

$$
p^2 = \frac{1}{r^2}\left[\left(\underline{r}\,\underline{p}\right)^2 + \frac{\hbar}{i}\,\underline{r}\,\underline{p}\right] + \frac{L^2}{r^2} \quad . \tag{441}
$$

Definiáljuk a *radiális impulzus* operátorát:

$$
p_r \equiv \frac{1}{r}\underline{r}\,\underline{p} + \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\,, \tag{442}
$$

melynek négyzete

$$
p_r^2 \equiv \left(\frac{1}{r}\underline{r}\,\underline{p}\right)^2 + \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r^2}\underline{r}\,\underline{p} + \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\underline{r}\,\underline{p}\frac{1}{r} - \frac{\hbar^2}{r^2} \quad . \tag{443}
$$

Segédtételek:

$$
[p_k, f(r)] = \frac{\hbar}{i}\,f'(r)\,\frac{x_k}{r} \quad \longrightarrow \quad \left[p_k, \frac{1}{r}\right] = -\frac{\hbar}{i}\,\frac{x_k}{r^3} \tag{444}
$$

$$
[p_k, f(r)\,x_i] = \frac{\hbar}{i}\,\left(f(r)\,\delta_{ki} + f'(r)\,\frac{x_k x_i}{r}\right) \quad \longrightarrow \quad \left[p_k, \frac{x_i}{r}\right] = \frac{\hbar}{i}\,\left(\frac{1}{r}\delta_{ki} - \frac{x_k x_i}{r^3}\right) \quad . \tag{445}
$$

A fenti összefüggések felhasználásával

$$\left(\frac{1}{r}\underline{r}\,\underline{p}\right)^2 = \frac{x_k}{r}p_k\frac{x_i}{r}p_i = \frac{x_kx_i}{r^2}p_kp_i + \frac{x_k}{r}\frac{\hbar}{i}\left(\frac{1}{r}\delta_{ki} - \frac{x_kx_i}{r^3}\right)p_i$$
$$= \frac{x_k}{r^2}\underbrace{\left(x_i\,p_k + \frac{\hbar}{i}\delta_{ki}\right)}_{=p_kx_i}p_i - \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r^2}\underline{r}\,\underline{p} = \frac{1}{r^2}\left(\underline{r}\,\underline{p}\right)^2 - \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r^2}\underline{r}\,\underline{p} \quad , \tag{446}$$

valamint

$$\frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\underline{r}\,\underline{p}\,\frac{1}{r} = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r^2}\underline{r}\,\underline{p} + \frac{\hbar^2}{r^2} \quad , \tag{447}$$

adódik, amit behelyettesítve az (443) egyenletbe a

$$p_r^2 = \frac{1}{r^2}\left[\left(\underline{r}\,\underline{p}\right)^2 + \frac{\hbar}{i}\,\underline{r}\,\underline{p}\right] \tag{448}$$

kifejezést nyerjük. A fenti kifejezéshez eljuthatunk úgy is, ha kihasználjuk a p_r operátort gömbi polárkoordinátás reprezentációját,

$$p_r = \frac{\hbar}{i}\left(\partial_r + \frac{1}{r}\right) = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\partial_r\,r \quad . \tag{449}$$

Ekkor ugyanis

$$p_r^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{r}\partial_r\,r\right)^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{r}\partial_r^2\,r\right) = -\hbar^2\frac{1}{r}\partial_r\left[\,r\,\partial_r + 1\right] \tag{450}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{r^2}\left[r\,\partial_r\,r\,\partial_r + r\,\partial_r\right] . \tag{451}$$

ami valóban az (448) operátor (polár)koordináta reprezentációja .Az (441) egyenlet alapján rögtön látjuk, hogy

$$p^2 = p_r^2 + \frac{L^2}{r^2}\,, \tag{452}$$

ami a klasszikus összefüggés analogonja azzal a különbséggel, hogy a cserelációk következtében a radiális impulzus kifejezésében megjelenik a $\frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}$ tag. Mivel az L_i operátor kommutál az L^2, p^2 és r^2 operátorokkal, látható, hogy

$$\left[L_i, p_r^2\right] = 0 \quad . \tag{453}$$

A p^2 operátor polárkoordinátás alakjából

$$p^2 = -\hbar^2\Delta$$
$$= -\hbar^2\left[\frac{1}{r}\,\partial_r^2\,r + \frac{1}{r^2}\left(\partial_\vartheta^2 + \cot\vartheta\,\partial_\vartheta + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\partial_\varphi^2\right)\right] \tag{454}$$

most már könnyen le tudjuk választani az L^2 operátor kifejezését,

$$L^2 = -\hbar^2\left(\partial_\vartheta^2 + \cot\vartheta\,\partial_\vartheta + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\partial_\varphi^2\right) \quad . \tag{455}$$

Mivel az L^2 operátor csak a polár és azimutális szögkoordináták szerinti deriválásokat ill. azok szöggfüggvényeit tartalmazza, így természetes, hogy felcserélhető az r és a p_r operátorokkal.

8.5. L^2 sajátértékei és sajátfüggvényei

Legyen $Y(\vartheta,\varphi)$ az L^2 operátor sajátfüggvénye $\hbar^2\Lambda$ sajátértékkel,

$$-\left(\partial_\vartheta^2+\cot\vartheta\,\partial_\vartheta+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\partial_\varphi^2\right)Y(\vartheta,\varphi)=\Lambda\,Y(\vartheta,\varphi)\quad . \tag{456}$$

Egyszerű algebrai átalakítások után a

$$\sin^2\vartheta\left(\partial_\vartheta^2+\cot\vartheta\,\partial_\vartheta+\Lambda\right)Y(\vartheta,\varphi)=-\partial_\varphi^2 Y(\vartheta,\varphi)\ , \tag{457}$$

egyenlethez jutunk,amiből látjuk, hogy a differenciálegyenlet megoldása szeparálható ϑ és φ szerint. Keressük tehát $Y(\vartheta,\varphi)$-t szorzatfüggvény alakban,

$$Y(\vartheta,\varphi)=F(\vartheta)\,G(\varphi)\quad . \tag{458}$$

Behelyettesítés és további átalakítások után nyerjük

$$\frac{\sin^2\vartheta}{F(\vartheta)}\left(F''(\vartheta)+\cot\vartheta\,F'(\vartheta)+\Lambda\,F(\vartheta)\right)=-\frac{G''(\varphi)}{G(\varphi)}\quad . \tag{459}$$

Nyilvánvaló, hogy az egyenlőséget csak úgy biztosíthatjuk, ha az egyenlet mindkét oldala ugyanazon konstanssal egyezik meg. Jelöljük ezt a konstanst α-val. Ekkor

$$G''(\varphi)+\alpha G(\varphi)=0\,, \tag{460}$$

mely triviális normált megoldása

$$G(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm i\sqrt{\alpha}\varphi}\quad . \tag{461}$$

Az egyértékűség miatt $\sqrt{\alpha}=m\quad(m=0,\pm1,\pm2,\ldots)$, tehát az elvárásnak megfelelően $Y(\vartheta,\varphi)$ egyben L_z sajátfüggvénye is,

$$Y(\vartheta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}F(\vartheta)\ e^{im\varphi}\quad . \tag{462}$$

Az F függvényt meghatározó differenciálegyenlet

$$F''(\vartheta)+\cot\vartheta\,F'(\vartheta)+\left(\Lambda-\frac{m^2}{\sin^2\vartheta}\right)F(\vartheta)=0\quad . \tag{463}$$

Térjünk át az $x=\cos\vartheta$ változóra! (Mivel $\vartheta\in[0,\pi]$, ezen a tartományon $\cos\vartheta$ szigorúan monoton függvény és $x\in[-1,1]$). Legyen $\widetilde{F}(x)=F(\vartheta)$. Ekkor

$$\frac{dF(\vartheta)}{d\vartheta}=\frac{d\widetilde{F}(x)}{dx}\frac{dx}{d\vartheta}=-\sin\vartheta\frac{d\widetilde{F}(x)}{dx}\quad\longrightarrow\cot\vartheta\frac{dF(\vartheta)}{d\vartheta}=-x\frac{d\widetilde{F}(x)}{dx}$$

valamint

$$\frac{d^2F(\vartheta)}{d\vartheta^2}=\frac{d}{dx}\left(-\sqrt{1-x^2}\frac{d\widetilde{F}(x)}{dx}\right)\frac{dx}{d\vartheta}=\left(1-x^2\right)\frac{d^2\widetilde{F}(x)}{dx^2}-x\frac{d\widetilde{F}(x)}{dx}\quad ,$$

tehát

$$\left(1-x^2\right)\frac{d^2\widetilde{F}(x)}{dx^2}-2x\frac{d\widetilde{F}(x)}{dx}+\left(\Lambda-\frac{m^2}{1-x^2}\right)\widetilde{F}(x)=0\quad , \tag{464}$$

vagy

$$\frac{d}{dx}\left[\left(1-x^2\right)\frac{d}{dx}\right]\widetilde{F}\left(x\right)+\left(\Lambda-\frac{m^2}{1-x^2}\right)\widetilde{F}\left(x\right)=0 \quad . \tag{465}$$

A Sommerfeld polinom módszerben megismert eljárás szerint keressük az 'aszimptotikus' megoldást $x^2 \to 1$ esetben,

$$\frac{d}{dx}\left[\left(1-x^2\right)\frac{d}{dx}\right]\widetilde{F}\left(x\right)-\frac{m^2}{1-x^2}\widetilde{F}\left(x\right)=0 \quad . \tag{466}$$

Próbálkozzunk az $\widetilde{F}_a\left(x\right)=\left(1-x^2\right)^s$ függvényalakkal:

$$\frac{d\widetilde{F}_a\left(x\right)}{dx}=-2\,s\,x\left(1-x^2\right)^{s-1} \quad \longrightarrow \quad \left(1-x^2\right)\frac{d\widetilde{F}_a\left(x\right)}{dx}=-2\,s\,x\left(1-x^2\right)^s \quad \longrightarrow$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}\left[\left(1-x^2\right)\frac{d}{dx}\right]\widetilde{F}_a\left(x\right)&=-2\,s\,\left(1-x^2\right)^s+4s^2x^2\left(1-x^2\right)^{s-1}\\&=\left(1-x^2\right)^{s-1}\left(-2\,s\,\left(1-x^2\right)+4s^2x^2\right)\underset{x^2\longrightarrow 1}{\longrightarrow}4s^2\left(1-x^2\right)^{s-1} \quad .\end{aligned}$$

Visszahelyettesítés után kapjuk:

$$4s^2-m^2=0 \quad \longrightarrow \quad s=\frac{|m|}{2} \quad , \tag{467}$$

azaz a keresett aszimptotikus megoldás

$$\widetilde{F}_a\left(x\right)=\left(1-x^2\right)^{|m|/2} \quad . \tag{468}$$

Ezek után a (465) egyenlet megoldását

$$\widetilde{F}\left(x\right)=\left(1-x^2\right)^{|m|/2}P(x)$$

alakban vesszük föl. Elvégezve a szükséges műveleteket:

$$\frac{d\widetilde{F}\left(x\right)}{dx}=\left(1-x^2\right)^{|m|/2}P'(x)-|m|\,x\left(1-x^2\right)^{|m|/2-1}P(x)$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}\left[\left(1-x^2\right)\frac{d}{dx}\right]\widetilde{F}\left(x\right)&=\frac{d}{dx}\left[\left(1-x^2\right)^{|m|/2+1}P'(x)-|m|\,x\left(1-x^2\right)^{|m|/2}P(x)\right]\\&=\left(1-x^2\right)^{|m|/2}\Big[\left(1-x^2\right)P''(x)-\left(|m|+2\right)xP'(x)-|m|\,xP'(x)\\&\qquad -|m|P(x)+m^2\frac{x^2}{1-x^2}P(x)\Big]\\&=\left(1-x^2\right)^{|m|/2}\left[\left(1-x^2\right)P''(x)-2\left(|m|+1\right)xP'(x)-|m|\left(|m|+1\right)P(x)+\frac{m^2}{1-x^2}P(x)\right] \quad ,\end{aligned}$$

és behelyettesítve (465)-ba a következő differenciálegyenletet kapjuk P-re:

$$\left(1-x^2\right)P''(x)-2\,\left(|m|+1\right)\,xP'(x)+\left(\Lambda-|m|\left(|m|+1\right)\right)\,P(x)=0 \quad . \tag{469}$$

P hatványsorát,

$$P(x) = \sum_{r=0}^{\infty} c_r x^r$$
$$\Downarrow$$
$$-2\,(|m|+1)\;xP'(x) = \sum_{r=0}^{\infty} \left[-2\,(|m|+1)\,rc_r\right] x^r$$
$$\left(1-x^2\right) P''(x) = \sum_{r=0}^{\infty} (r+1)\,(r+2)\,c_{r+2}x^r - \sum_{r=2}^{\infty} r\,(r-1)\,c_r x^r$$

beírva a fenti egyenletbe és az x^r hatványtagok együtthatóit vizsgálva kapjuk:

$$(r+1)\,(r+2)\,c_{r+2} - \left(r\,(r-1) + 2\,(|m|+1)\,r + |m|\,(|m|+1) - \Lambda\right) c_r = 0 \quad , \tag{470}$$

azaz

$$c_{r+2} = \frac{r\,(r-1) + 2\,(|m|+1)\,r + |m|\,(|m|+1) - \Lambda}{(r+1)\,(r+2)} c_r$$

$$= \frac{(r+|m|)\,(r+|m|+1) - \Lambda}{(r+1)\,(r+2)} c_r \quad . \tag{471}$$

Látható, hogy a megoldások (a harmonikus oszcillátoréhoz hasonlóan) csak páros vagy csak páratlan x hatványokat tartalmaznak. Ez ismételten azzal van összefüggésben, hogy L^2 kommutál a paritás operátorral:

$$P : \underline{r} \to -\underline{r} \quad \longrightarrow \quad \vartheta \to \pi - \vartheta \quad \longrightarrow \quad \cos\vartheta \to \cos\left(\pi - \vartheta\right) = -\cos\vartheta \quad ,$$

így a páros megoldások paritása 1, míg a páratlanoké -1. Az együtthatók hányadosa $r \to \infty$ esetben $c_{r+2}/c_r \to 1$, tehát a megoldás közelíthető

$$\widetilde{F}\,(x) \simeq \left(1-x^2\right)^{|m|/2} \left(A(x) + Bx^{r_0} \sum_{r=0,2,4,\ldots} x^r \right) = \left(1-x^2\right)^{|m|/2} A(x) + Bx^{r_0} \left(1-x^2\right)^{|m|/2-1} \tag{472}$$

alakban, ahol az r_0 fokszám, $A(x)$ véges polinom és a B konstans a közelítés pontosságához állítható. Látható, hogy a fenti függvény, legalábbis $|m| \leq 1$ esetén, $x = \pm 1$-re divergál. A megoldás függvények értelmezési tartományába viszont beletartoznak a $\vartheta = 0$ és π értékek, így ezt a divergenciát ki kell küszöbölnünk. Ezt úgy tudjuk elérni, hogy valamely $r = t$ küszöbindexre, melyre $c_t \neq 0$, biztosítjuk, hogy $c_{t+2} = 0$, azaz

$$\Lambda = (t+|m|)\,(t+|m|+1) \quad . \tag{473}$$

Nevezzük el a $t + |m|$ értékét ℓ-nek, mely tehát tetszőleges nemnegatív egész szám lehet:

$$\Lambda = \ell\,(\ell+1)\;, \qquad \ell = 0, 1, 2, \ldots \tag{474}$$

Ugyanakkor viszont egy rögzített ℓ-re a lehetséges m értékek:

$$m = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell-1, \ell \quad . \tag{475}$$

Az L^2 és L_z operátorok közös sajátfüggvény rendszere és sajátértékei tehát teljes összhangban vannak az általános (reprezentáció független) levezetés eredményeivel azzal a kitétellel, hogy a j értékei itt csak egész számok lehetnek.

A $P(x)$ polinomokat, melyek értelemszerűen $\ell-|m|$-ed fokúak *asszociált Legendre polinomok*nak nevezzük és $P_\ell^{|m|}(x)$-el jelöljük. A sajátfüggvények az. ún. *gömbharmonikusok*

$$Y_\ell^m(\vartheta,\varphi) = A_\ell^{|m|} \sin^{|m|}(\vartheta)\, P_\ell^{|m|}(\cos\vartheta)\, e^{im\varphi} \quad , \tag{476}$$

ahol az $A_{\ell|m|}$ normálási együtthatók

$$A_\ell^{|m|} = \frac{1}{2^\ell \ell!}\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\sqrt{\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}} \; . \tag{477}$$

Szokás különböző fáziskonvenciókat is bevezetni. Pl. az ún. Condon-Shortly konvencióban:

$$Y_l^{-m}(\vartheta,\varphi)^* = (-1)^m Y_l^m(\vartheta,\varphi) \; . \tag{478}$$

Az első néhány gömbharmonikus:

ℓ	m	$Y_\ell^m(\vartheta,\varphi)$
0	0	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
1	0	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\vartheta$
1	±1	$\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta\exp(\pm i\varphi)$
2	0	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\vartheta-1)$
2	±1	$\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\vartheta\cos\vartheta\exp(\pm i\varphi)$
2	±2	$\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\vartheta\exp(\pm 2i\varphi)$

Összefoglalás:

$$\underline{L_z\, Y_\ell^m(\vartheta,\varphi) = \hbar m Y_\ell^m(\vartheta,\varphi)} \tag{479}$$

$$\underline{L^2 Y_\ell^m(\vartheta,\varphi) = \hbar^2\ell(\ell+1)Y_\ell^m(\vartheta,\varphi)} \tag{480}$$

$$\underline{-\ell \le m \le \ell \; , \;\; \ell = 0,1,2, \; ...} \tag{481}$$

Ortonormáltság:

$$\underline{\int Y_\ell^m(\vartheta,\varphi)^* Y_{\ell'}^{m'}(\vartheta,\varphi)d\Omega = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}} \tag{482}$$

Teljesség:

$$\underline{\sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^m(\vartheta,\varphi)\, Y_\ell^m(\vartheta',\varphi')^* = \frac{\delta(\vartheta-\vartheta')\,\delta(\varphi-\varphi')}{\sin\vartheta}} \tag{483}$$

$$(0<\vartheta\le\pi \quad , \; 0\le\varphi\le 2\pi \quad , \; d\Omega = \sin\vartheta d\vartheta d\varphi)$$

8.5.1. Kétatomos molekulák rotációs spektruma (vázlat)

$$H = \frac{L^2}{2\Theta} \tag{484}$$

$$E_{A\ell} = E_A + \frac{\hbar^2}{2\Theta}\ell(\ell+1) \tag{485}$$

$$E_{B\ell'} = E_B + \frac{\hbar^2}{2\Theta}\ell'(\ell'+1) \tag{486}$$

$$h\nu_{B\ell'\to A\ell} = E_B - E_A + \frac{\hbar^2}{2\Theta}\left(\ell'(\ell'+1) - \ell(\ell+1)\right) \tag{487}$$

Kiválasztási szabály (l. időfüggő perturbációszámítás)$\to$ $\ell' = \ell \pm 1$

$$\begin{aligned} \underline{h\nu_{B(\ell+1)\to A\ell}} &= E_B - E_A + \frac{\hbar^2}{2\Theta}\left((\ell+1)(\ell+2) - \ell(\ell+1)\right) \\ &= \underline{E_B - E_A + \frac{\hbar^2}{\Theta}(\ell+1) \quad , \quad \ell = 0,1,2,\ldots} \end{aligned} \tag{488}$$

$$\begin{aligned} \underline{h\nu_{B(\ell-1)\to A\ell}} &= E_B - E_A + \frac{\hbar^2}{2\Theta}\left((\ell-1)\ell - \ell(\ell+1)\right) \\ &= \underline{E_B - E_A - \frac{\hbar^2}{\Theta}\ell \quad , \quad \ell = 1,2,3,\ldots} \end{aligned} \tag{489}$$

Következmény: a null-vonal hiánya, azaz a $\hbar^2/\Theta$ egyenközű spektrumban van egy $2\hbar^2/\Theta$ mértékű vonalköz.

Bohr-modell:

$$E_{rot} = \frac{\hbar^2}{2\Theta}\ell^2 \quad , \quad \ell = 1,2,3,\ldots \tag{490}$$

$$\begin{aligned} h\nu_{B(\ell+1)\to A\ell} &= E_B - E_A + \frac{\hbar^2}{2\Theta}\left((\ell+1)^2 - \ell^2\right) \\ &= E_B - E_A + \frac{\hbar^2}{\Theta}\left(\ell + \frac{1}{2}\right) \quad , \quad \ell = 0,1,2,\ldots \end{aligned} \tag{491}$$

$$\begin{aligned} h\nu_{B(\ell-1)\to A\ell} &= E_B - E_A + \frac{\hbar^2}{2\Theta}\left((\ell-1)^2 - \ell^2\right) \\ &= E_B - E_A - \frac{\hbar^2}{\Theta}\left(\ell - \frac{1}{2}\right) \quad , \quad \ell = 1,2,3,\ldots \end{aligned} \tag{492}$$

Tehát az egyenközű spektrumszerkezetben itt nem jelenne meg egy dupla méretű vonalköz!

9. A hidrogénatom spektruma

9.1. A radiális Schrödinger-egyenlet

Centrális potenciál

$$V(\underline{r}) = V(r) \ , \tag{493}$$

esetén a

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r)\right]\psi(\underline{r}) = E\psi(\underline{r}) \tag{494}$$

időfüggetlen Schrödinger egyenlet megoldását kereshetjük a

$$\psi(\underline{r}) = P(r)\, Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) \tag{495}$$

alakban. Behelyettesítés után, (480) felhasználásával a $P(r)$ függvényre a

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r)\right]P(r) = EP(r) \tag{496}$$

differenciálegyenletet kapjuk. Használjuk az ismert

$$p_r^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{r}\partial_r^2\, r\right) \tag{497}$$

összefüggést és vezessük be az

$$R(r) = rP(r) \tag{498}$$

radiális hullámfüggvényt. Ekkor a (496) egyenletet átírhatjuk a

$$\underline{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r)\right]R(r) = ER(r)} \tag{499}$$

alakba, amit *radiális Schrödinger egyenlet*nek hívunk.

9.2. A hidrogénatom kötött állapotai

Tekintsünk egy Z rendszámú atomot! Ekkor egy elektronra

$$V(r) = -\frac{kZe^2}{r} \tag{500}$$

vonzó potenciál hat. Mivel a potenciál $r \to \infty$-ben 0-hoz tart alúlról, a kötött állapotok negatív energiájúak,

$$E = -|E| \ . \tag{501}$$

A (499) egyenletet ezért a következőképpen alakíthatjuk át,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2} - \frac{Zke^2}{r} + |E|\right]R(r) = 0 \ , \tag{502}$$

$$\Downarrow$$

$$\left[\frac{\hbar^2}{8m|E|}\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\hbar^2}{8m|E|}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{Zke^2}{4r|E|} - \frac{1}{4}\right]R(r) = 0 \ . \tag{503}$$

Bevezetve a

$$\xi = \frac{\sqrt{8m|E|}r}{\hbar} = \frac{2r}{r_0} \tag{504}$$

változót, ahol

$$r_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{2m|E|}} \ , \ |E| = \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \tag{505}$$

és az

$$\varepsilon = \frac{Zke^2}{2|E|r_0} = Zr_0\frac{ke^2}{2|E|r_0^2} = Zr_0\frac{mke^2}{\hbar^2} = Z\frac{r_0}{a_0} \ , \ a_0 = \frac{\hbar^2}{mke^2} \ , \tag{506}$$

paramétereket, ahol $a_0 = 0.529 \times 10^{-10}$ m a Bohr sugár, a

$$\frac{d^2R(\xi)}{d\xi^2} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\varepsilon}{\xi} - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2}\right]R(\xi) = 0 \tag{507}$$

differenciálegyenlethez jutunk. (A változócsere után a némiképp pongyola, $R(\xi) = R(r(\xi))$ jelölést használjuk.) A fenti egyenlet megoldásait könnyen megtaláljuk az értelmezési tartomány, $\xi \in (0,\infty)$, aszimptotikus pontjaiban:

$\xi \to \infty$

$$\frac{d^2R(\xi)}{d\xi^2} - \frac{1}{4}R(\xi) = 0 \implies R(\xi) \propto e^{-\frac{1}{2}\xi} \ , \tag{508}$$

$\xi \to 0$

$$\frac{d^2R(\xi)}{d\xi^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2}R(\xi) = 0 \implies R(\xi) \propto \xi^{\ell+1} \ . \tag{509}$$

A (507) egyenlet megoldását, a Sommerfeld polinom módszer szellemében, keressük a

$$R(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi}u(\xi) \tag{510}$$

alakban:

$$\frac{dR(\xi)}{d\xi} = e^{-\frac{1}{2}\xi}\left[-\frac{1}{2}u(\xi) + u'(\xi)\right] \ , \tag{511}$$

$$\frac{d^2R(\xi)}{d\xi^2} = e^{-\frac{1}{2}\xi}\left[\frac{1}{4}u(\xi) - u'(\xi) + u''(\xi)\right] \ , \tag{512}$$

melyet behelyettesítve a (507) egyenletbe az

$$u''(\xi) - u'(\xi) + \left[\frac{\varepsilon}{\xi} - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2}\right]u(\xi) = 0 \tag{513}$$

egyenlethez jutunk. A megoldást polinom alakban keressük. Ez nyilvánvalóan nem tartalmazhat konstans tagot, mert akkor $\xi \to 0$ limeszben a (513) egyenlet első két tagja zérushoz tart, a harmadik tag pedig divergál. Célszerű ezért a megoldást

$$u(\xi) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i\,\xi^{i+s} \tag{514}$$

alakban felvenni, ahol s-et iniciális indexnek nevezik ($s \geq 1$). A szükséges deriválásokat

$$u'(\xi) = \sum_{i=0}^{\infty}(i+s)\,c_i\,\xi^{i+s-1} = \sum_{i=1}^{\infty}(i+s-1)\,c_{i-1}\,\xi^{i+s-2} \ , \tag{515}$$

$$u''(\xi) = \sum_{i=0}^{\infty} (i+s)(i+s-1)\, c_i\, \xi^{i+s-2} , \tag{516}$$

és behelyettesítést

$$\left[\frac{\varepsilon}{\xi} - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2}\right] u(\xi) = \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon c_i\, \xi^{i+s-1} - \sum_{i=0}^{\infty} \ell(\ell+1)\, c_i\, \xi^{i+s-2} = \sum_{i=1}^{\infty} \varepsilon c_{i-1}\, \xi^{i+s-2} - \sum_{i=0}^{\infty} \ell(\ell+1)\, c_i\, \xi^{i+s-2} \tag{517}$$

elvégezve a következő egyenletrendszert nyerjük:

$$[s(s-1) - \ell(\ell+1)]\, c_0 \xi^{s-2} + \sum_{i=1}^{\infty} \left\{[(i+s)(i+s-1) - \ell(\ell+1)]\, c_i - [(i+s-1) - \varepsilon]\, c_{i-1}\right\} \xi^{i+s-2} = 0 , \tag{518}$$

mely tetszőleges ξ-re akkor teljesül, ha mindegyik hatványtag együtthatója eltünik. A legkisebb kitevőjű hatványtag együtthatóját vizsgálva ($c_0 \neq 0$),

$$s(s-1) - \ell(\ell+1) = 0 \implies s = \begin{cases} \ell+1 \\ -\ell \end{cases} , \tag{519}$$

amiből nyilvánvalóan csak az $s = \ell + 1$ választás szolgáltat az origóban reguláris megoldást. A többi hatványtag együtthatójából a

$$c_i = \frac{i+\ell-\varepsilon}{(i+\ell)(i+\ell+1) - \ell(\ell+1)} c_{i-1} = \frac{i+\ell-\varepsilon}{i(i+2\ell+1)} c_{i-1} , \qquad (i = 1, 2, \ldots) \tag{520}$$

rekurziós összefüggés adódik. Mivel a c_i/c_{i-1} hányados nagy i-re $1/i$-hez tart, nagy ξ-re $u(\xi) \propto e^{\zeta}$, következésképpen $R(\xi) \propto e^{\frac{1}{2}\xi}$, ami nyilvánvalóan divergens $\xi \to \infty$ esetén. Reguláris megoldást tehát csak úgy kapunk, ha $u(\xi)$ véges polinom, azaz létezik olyan $i_{\max} = 1, 2, \ldots$, hogy $c_{i_{\max}-1} \neq 0$, viszont $c_{i_{\max}} = 0$. Ekkor

$$\varepsilon = i_{\max} + \ell . \tag{521}$$

Vezessük be az

$$n = i_{\max} + \ell \tag{522}$$

jelölést, amit *főkvantumszám*nak nevezünk. Nyilvánvalóan,

$$\underline{n = 1, 2, 3, \ldots \text{ és } \ell = 0, 1, \ldots, n-1 ,} \tag{523}$$

$$r_0 = \frac{n a_0}{Z} , \tag{524}$$

valamint a sajátenergia,

$$\underline{E_n} = -\frac{\hbar^2}{2mr_0^2} = -\frac{\hbar^2 Z^2}{2ma_0^2}\frac{1}{n^2} = \underline{-\frac{m\left(kZe^2\right)^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{kZe^2}{2a_0}\frac{1}{n^2}} . \tag{525}$$

A hullámfüggvény:

$$\underline{\psi_{n\ell m}(\underline{r}) = \frac{1}{r} L_{n\ell}(r/2r_0)\, e^{-r/r_0}\, Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) ,} \tag{526}$$

ahol $L_{n\ell}$ az ún. Laguerre polinomokat jelöli. A fentiekből következik, hogy az $L_{n\ell}$ polinom az $\ell+1$-ik hatvánnyal kezdődik és a legmagasabb hatványkitevő $(i_{\max} - 1) + (\ell + 1) = i_{\max} + \ell = n$. Ezért a polinom $n - \ell$ (egymást követő) hatványtagot tartalmaz, így zérushelyeinek száma

$n-\ell-1$. Ezek a hullámfüggvény csomófelületei. Fontos tény, hogy a sajátenergia csak az n főkvantumszámtól függ, az ℓ *mellékkvantumszám*tól és az m *mágneses kvantumszám*tól nem (bár ez utóbbit nem is vártuk, mivel a radiális Schrödinger egyenletben az nem is szerepelt). Az energiaszintek degeneráltsága könnyen kiszámítható:

$$\sum_{\ell=0}^{n-1}(2\ell+1)=2\frac{n\,(n-1)}{2}+n=n^2\;. \tag{527}$$

Megjegyezzük, hogy centrális, de nem $1/r$ alakú potenciálra a sajátenergiák már ℓ-től is függnek.

A hidrogénatom alapállapoti energiája $E_1=-13.6$ eV, a gerjesztett állapotok energiája $E_n=E_1/n^2$ ($E_2=E_1/4$, $E_3=E_1/9$, stb.). Ez megnyugtatóan magyarázza a (durva) *vonalas színkép*et, melyben egymástól elkülönülő sorozatokat figyeltek meg. A legnagyobb frekvencia az alapállapot ionizációs energiájához tartozik: $-E_1=13.6$ eV. Ettől lefelé egy sűrű vonalsorozat indul, mely a gerjesztett állapotok és az alapállapot közötti átmenetnek felel meg,

$$h\nu_{n1}=E_n-E_1=-E_1\left(1-\frac{1}{n^2}\right)=13.6\left(1-\frac{1}{n^2}\right)\ \mathrm{eV}\quad(n\geq 2)\,. \tag{528}$$

Ezen sorozat, az ún. *Lymann sorozat* legalacsonyabb frekvenciája, $h\nu_{21}=13.6\cdot3/4$ eV=10.2 eV. A *Balmer sorozat* az első gerjesztett állapotra történő átmenetekkel értelmezhető:

$$h\nu_{n2}=E_n-E_2=-E_1\left(\frac{1}{4}-\frac{1}{n^2}\right)=3.4\left(1-\frac{4}{n^2}\right)\ \mathrm{eV}\quad(n\geq 3)\;. \tag{529}$$

A legnagyobb és legkisebb frekvencia ebben a sorozatban: $h\nu_{\infty2}=3.4$ eV és $h\nu_{32}=1.89$ eV. A *Paschen sorozat*nál a második gerjesztett állapotra 'ugrik' vissza az elektron:

$$h\nu_{n3}=E_n-E_3=-E_1\left(\frac{1}{9}-\frac{1}{n^2}\right)=1.51\left(1-\frac{9}{n^2}\right)\ \mathrm{eV}\quad(n\geq 4)\;, \tag{530}$$

a frekvencia tartomány, $h\nu_{n3}\in[0.66\ \mathrm{eV},\,1.51\ \mathrm{eV})$.

A hidrogénatom kötött állapoti hullámfüggvényei ortonormáltak,

$$\int d^3r\,\psi^*_{n\ell m}(\underline{r})\,\psi_{n'\ell'm'}(\underline{r})=\delta_{nn'}\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}\;, \tag{531}$$

de nem alkotnak teljes rendszert. A Hamilton operátornak ugyanis van folytonos spektruma ($E>0$), és a teljességi összefüggés ezek figyelembevételével írható fel,

$$\sum_{n\ell m}\psi_{n\ell m}(\underline{r})\,\psi^*_{n\ell m}(\underline{r}')+\sum_{\ell m}\int_0^\infty dE\,\psi_{\ell m}(E;\underline{r})\,\psi^*_{\ell m}(E;\underline{r}')=\delta(\underline{r}-\underline{r}')\;. \tag{532}$$

Érdemes megvizsgálni a hidrogénatom elektronjának megtalálási valószínűségsűrűségét a sajátállapotokban. Ezt a

$$\varrho_{n\ell m}(\underline{r})=|\psi_{n\ell m}(\underline{r})|^2=P^2_{n\ell}(r)\;|Y^m_\ell(\vartheta,\varphi)|^2 \tag{533}$$

függvény írja le, ahol a $P_{n\ell}(r)=\frac{1}{r}L_{n\ell}(r/2r_0)\;e^{-r/r_0}$ radiális hullámfüggvény függvény r^ℓ szerint indul az origóban. Ebből következik, hogy az $\ell=0$ mellékkvantumszámú állapotokban (s állapotok) az elektron tartózkodási valószínűségsűrűsége a mag helyén különbözik zérustól, sőt, az alapállapotban ($n=0$, $\ell=0$) itt a legnagyobb az elektron tartózkodási valószínűségsűrűsége. Ez azért nem jelent értelmezési problémát, mert az elektron tartózkodási valószínűségét egy adott térfogatelemben kell tekinteni,

$$\varrho_{n\ell m}(\underline{r})\,d^3r=\left(P^2_{n\ell}(r)\,r^2dr\right)\;\left(|Y^m_\ell(\vartheta,\varphi)|^2\,d(\cos\vartheta)\,d\varphi\right)\;. \tag{534}$$

A $R_{n\ell}^2(r) = P_{n\ell}^2(r)\, r^2 = L_{n\ell}^2(r/2r_0)\, e^{-2r/r_0}$ függvény viselkedése az origó közelében $r^{2\ell+2}$, ami már tetszőleges ℓ-re zérust ad $r = 0$ esetén. A mag környezetében felvett infinitezimális térfogatelemben a megtalálási valószínűség tehát zérushoz tart.

Célszerű megkérdezni, hogy az elektron milyen valószínűséggel tartózkodik egy $(r, r+dr)$ gömbhéjban. A gömbharmonikusok normáltsága miatt:

$$\int d(\cos\vartheta) \int d\varphi\, \varrho_{n\ell m}(\underline{r})\; r^2 dr = R_{n\ell}^2(r)\; dr = w_{nl}(r)\; dr \tag{535}$$

ahol $w_{nl}(r) = R_{n\ell}^2(r)$ mennyiséget *radiális megtalálási valószínűség*nek nevezzük. Mint már megállapítottuk, a radiális hullámfüggvény $n - \ell - 1$ zérushellyel rendelkezik: ezen sugarú gömbfelületeken az elektron megtalálási valószínűsége zérus, ezért ezeket csomógömböknek hívjuk. Nyilvánvaló, hogy az $(n, \ell = n-1)$ állapotok esetében nincsenek csomógömbök. Azt a gömbhéjat, ahol az elektron a legnagyobb valószínűséggel tartózkodik, a Bohr elmélet szerinti pályasugárként $(r_{n\ell})$ definiálhatjuk. A

$$\frac{dW_{nl}(r)}{dr} = 2R_{n\ell}(r)\,\frac{dR_{nl}(r)}{dr} = 0 \tag{536}$$

összefüggés alapján, a maximumok helyét a

$$\frac{dR_{nl}(r)}{dr} = 0 \tag{537}$$

feltétel szabja ki (a minimumok a zérushelyek). Könnyű kiszámolni az $(n, \ell = n-1)$ állapotok pályasugarát, ugyanis ebben az esetben $R_{n\ell}(r) = A\, r^n \exp\left(-\frac{Zr}{na_0}\right)$, amiből

$$\frac{dR_{nl}(r)}{dr} = Ar^{n-1}\exp\left(-\frac{Zr}{na_0}\right)\left(n - r\frac{Z}{na_0}\right) = 0$$

$$\Downarrow$$

$$r_{n,n-1} = n^2\frac{a_0}{Z} \tag{538}$$

következik.

Értelmezhetjük viszont a pályasugarat a radiális koordináta kvantummechanikai átlagán keresztül. A Laguerre-polinomok rekurziós összefüggéseinek ügyes használatával kiszámolható, hogy ennek értéke,

$$\begin{aligned}\langle r\rangle_{n\ell} &= \int d^3r\, \psi_{n\ell m}^*(\underline{r})\; r\, \psi_{n\ell m}(\underline{r}) = \int_0^\infty dr\, r\, R_{n\ell}^2(r) = \int_0^\infty dr\, r\, w_{n\ell}(r) \\ &= \frac{1}{2}\frac{a_0}{Z}\big(3n^2 - \ell(\ell+1)\big)\ .\end{aligned} \tag{539}$$

Speciálisan,

$$\langle r\rangle_{n,n-1} = n\left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{a_0}{Z}\ . \tag{540}$$

Ez közvetlen számolással is igazolható:

$$\begin{aligned}\langle r\rangle &= \frac{\int_0^\infty dr\, r^{2n+1}\exp\left(-\frac{2Zr}{na_0}\right)}{\int_0^\infty dr\, r^{2n}\exp\left(-\frac{2Zr}{na_0}\right)} = \frac{na_0}{2Z}\frac{\int_0^\infty dx\, x^{2n+1}e^{-x}}{\int_0^\infty dx\, x^{2n}e^{-x}} \\ &= \frac{(2n+1)\, na_0}{2Z} = n\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{a_0}{Z}\ .\end{aligned}$$

ahol felhasználtuk, hogy $\int_0^\infty dx\, x^{n+1}e^{-x} = (n+1)\int_0^\infty dx\, x^n e^{-x}$. Látható tehát, hogy a kétfajta értelmezés nem ugyanazt az értéket eredményezi a pályasugárra: a kvantummechanikai átlagérték kisebb, mint a maximális tartózkodási valószínűségű gömbhéj sugara.

10. Időfüggetlen (Rayleigh-Schrödinger) perturbációszámítás

Tegyük fel, hogy ismerjük a H_0 Hamilton-operátor ε_i^0 sajátértékeit és ψ_i^0 sajátvektorait:

$$H_0 \psi_n^0 = \varepsilon_n^0 \psi_n^0 \,. \tag{541}$$

A

$$H = H_0 + W \tag{542}$$

perturbált Hamilton-operátor sajátérték problémájának egzakt megoldása helyett perturbatív közelítést alkalmazunk. Bevezetve a $\lambda \in [0,1]$ paramétert, a

$$\left(H_0 + \lambda W\right) \psi_n = \varepsilon_n \psi_n \tag{543}$$

egyenlet közelítő megoldását keressük. Nyilvánvaló, hogy $\lambda = 0$ esetén a perturbálatlan H_0 operátor, $\lambda = 1$ esetén pedig a perturbált $H_0 + W$ operátor sajátérték problémáját kapjuk vissza.

Ha H_0 n-ik sajátértéke *nemelfajult* (nemdegenerált), írjuk fel a perturbált sajátvektort a

$$\psi_n = A \left(\psi_n^0 + \delta\psi_n\right) \tag{544}$$

alakban, ahol $A \in \mathbb{C}$ a perturbált sajátvektor normálására szolgáló konstans. Az általánosság megszorítása nélkül feltehetjük, hogy $\delta\psi_n$-nek a $\{\psi_k^0\}$ TONR szerinti kifejtésében ψ_n^0 nem szerepel, azaz

$$\left\langle \psi_n^0 \right| \delta\psi_n \rangle = 0 \,. \tag{545}$$

Fejtsük sorba az ε_n sajátértéket és a sajátvektor $\delta\psi_n$ korrekcióját $\lambda = 0$ körül,

$$\varepsilon_n = \varepsilon_n^0 + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \, \varepsilon_n^{(k)} \tag{546}$$

és, mivel $\delta\psi_n \underset{\lambda\to 0}{\to} 0$,

$$\delta\psi_n = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \, \psi_n^{(k)} \,. \tag{547}$$

Az $\varepsilon_n^{(k)}$ és $\psi_n^{(k)}$ $(k = 1, 2, \ldots)$ mennyiségeket a sajátértékek és a sajátvektorok k-adrendű perturbációs korrekcióinak nevezzük. A (545) tulajdonságból következik, hogy

$$\sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \, \langle \psi_n^0 | \psi_n^{(k)} \rangle = 0 \Rightarrow \langle \psi_n^0 | \psi_n^{(k)} \rangle = 0 \,, \tag{548}$$

azaz a sajátvektor perturbatív korrekciói ortogonálisak a ψ_n^0 perturbálatlan sajátvektorra.

Az (543) egyenletet felhasználva,

$$\left\langle \psi_n^0 | H_0 \psi_n \right\rangle + \lambda \left\langle \psi_n^0 | W \psi_n \right\rangle = \varepsilon_n \left\langle \psi_n^0 | \psi_n \right\rangle \tag{549}$$

$$\Downarrow$$

$$\varepsilon_n = \varepsilon_n^0 + \lambda \left\langle \psi_n^0 | W(\psi_n^0 + \delta\psi_n) \right\rangle \,, \tag{550}$$

majd az (546) és (547) sorfejtéseket behelyettesítve,

$$\sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \, \varepsilon_i^{(k)} = \lambda \left\langle \psi_n^0 | W \psi_n^0 \right\rangle + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^{k+1} \langle \psi_n^0 | W \, | \psi_n^{(k)} \rangle \,. \tag{551}$$

A fenti egyenletben a $\lambda-$val arányos járulékok egyenlőségéből adódik az elsőrendű sajátérték korrekció:

$$\underline{\varepsilon_n^{(1)} = \langle \psi_n^0 | W \, | \psi_n^0 \rangle} \,. \tag{552}$$

A többi járulékra az

$$\sum_{k=2}^{\infty} \lambda^k \, \left(\varepsilon_n^{(k)} - \langle \psi_n^0 | W \, | \psi_n^{(k-1)} \rangle \right) = 0 \,,$$

egyenlet áll fenn, amiből az

$$\varepsilon_n^{(n)} = \langle \psi_n^0 | W \, | \psi_n^{(k-1)} \rangle \quad (k \geq 2) \tag{553}$$

összefüggés következik, ami persze $k = 1$-re is igaz, ha nulladrendben a nyilvánvaló $\psi_n^{(0)} = \psi_n^0$ definíciót használjuk.

Elsőrendű degenerált perturbációszámítás

Ha H_0 n-ik sajátértéke m-szeresen elfajult (degenerált), azaz

$$H_0 \psi_{n,\alpha}^0 = \varepsilon_n^0 \psi_{n,\alpha}^0 \quad (\alpha = 1, 2, \ldots, m)$$

$$\langle \psi_{n,\alpha}^0 | \psi_{n,\beta}^0 \rangle = \delta_{\alpha\beta} \,,$$

akkor a perturbált sajátvektort elsőrendben továbbra is a

$$\psi_n = A(\psi_n^{(0)} + \lambda \, \psi_n^{(1)}) \tag{554}$$

$$\langle \psi_{n,\alpha}^0 | \psi_n^{(1)} \rangle = 0 \,,$$

alakban írhatjuk, viszont a nulladrendű sajátvektorra az általánosság megszorítása nélkül a

$$\psi_n^{(0)} = \sum_{\alpha=1}^{m} c_\nu \, \psi_{n,\alpha}^0 \tag{555}$$

kifejtést kell feltennünk. A sajátérték elsőrendű alakját az (543) egyenletbe helyettesítve,

$$(H_0 + \lambda W) \; \psi_n = \left(\varepsilon_n^0 + \lambda \varepsilon_n^{(1)} \right) \; \psi_n \,, \tag{556}$$

a λ-ban lineáris tagokból a

$$H_0 \psi_n^{(1)} + W \psi_n^{(0)} = \varepsilon_n^0 \psi_n^{(1)} + \varepsilon_n^{(1)} \psi_n^{(0)} \tag{557}$$

egyenletet kapjuk, melyet a $\psi_{n,\alpha}^0$ sajátvektorokkal skalárszorozva a

$$\langle \psi_{n,\alpha}^0 | W \, | \psi_n^{(0)} \rangle = \varepsilon_n^{(1)} \langle \psi_{n,\alpha}^0 | \psi_n^{(0)} \rangle \tag{558}$$

$$\Downarrow$$

$$\sum_{\beta=1}^{m} \langle \psi_{n,\alpha}^0 | W \, | \psi_{n,\beta}^0 \rangle \, c_\beta = \varepsilon_n^{(1)} c_\alpha \tag{559}$$

vagy a

$$\sum_{\beta=1}^{m}\left[\langle\psi^0_{n,\alpha}|W\,|\psi^0_{n,\beta}\rangle-\varepsilon^{(1)}_n\delta_{\alpha\beta}\right]c_\beta=0 \tag{560}$$

egyenletek adódnak. Bevezetve a perturbáló operátor mátrixát a H_0 operátor m-dimenziós degenerált alterén,

$$\mathbf{W}=\{W_{\alpha\beta}\}\qquad W_{\alpha\beta}=\langle\psi^0_{n,\alpha}|W\,|\psi^0_{n,\beta}\rangle\,, \tag{561}$$

az elsőrendű sajátérték korrekciókat a

$$\underline{\det\left(\mathbf{W}-\varepsilon^{(1)}_n\,\mathbf{I}\right)=0} \tag{562}$$

szekuláris egyenlet megoldásával kapjuk.

Másodrendű sajátérték korrekció nemelfajult esetben

Először a sajátvektor korrekcióinak számítására vezetünk le összefüggést. A sajátértékek és sajátvektorok λ szerinti sorfejtését behelyettesítve az (543) egyenletbe kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}(H_0+\lambda W)\left(\sum_{k=0}^{\infty}\lambda^k\,\psi^{(k)}_n\right)&=\left(\sum_{k=0}^{\infty}\lambda^k\,\varepsilon^{(k)}_n\right)\left(\sum_{k=0}^{\infty}\lambda^k\,\psi^{(k)}_n\right)\\&=\sum_{k=0}^{\infty}\lambda^k\left(\sum_{l=0}^{k}\varepsilon^{(l)}_n\psi^{(k-l)}_n\right)\,,\end{aligned} \tag{563}$$

ahol a jobboldalon a végtelen sorok Cauchy-szorzatát alkalmaztuk. A λ^k hatvánnyal arányos tagok egyenlőségéből,

$$H_0\psi^{(k)}_n+W\,\psi^{(k-1)}_n=\sum_{l=0}^{k}\varepsilon^{(l)}_n\psi^{(k-l)}_n\qquad(k=1,2,\ldots) \tag{564}$$

$$\Downarrow$$

$$\left(H_0-\varepsilon^0_n\right)\psi^{(k)}_n=-W\,\psi^{(k-1)}_n+\sum_{l=1}^{k}\varepsilon^{(l)}_n\psi^{(k-l)}_n \tag{565}$$

adódik. Felhasználva a H_0 operátor spektrálfelbontását,

$$\left(\sum_{i(\neq n)}\left(\varepsilon^0_i-\varepsilon^0_n\right)\left|\psi^0_i\right\rangle\left\langle\psi^0_i\right|\right)\psi^{(k)}_n=-W\,\psi^{(k-1)}_n+\sum_{l=1}^{k}\varepsilon^{(l)}_n\psi^{(k-l)}_n\,, \tag{566}$$

érdemes definiálni a

$$Q_n=\sum_{j(\neq n)}\frac{\left|\psi^0_j\right\rangle\left\langle\psi^0_j\right|}{\varepsilon^0_j-\varepsilon^0_n} \tag{567}$$

operátort, hiszen

$$\begin{aligned}Q_n\left(\sum_{i(\neq n)}\left(\varepsilon^0_i-\varepsilon^0_n\right)\left|\psi^0_n\right\rangle\left\langle\psi^0_n\right|\right)\psi^{(k)}_n&=\left(\sum_{i(\neq n)}\left|\psi^0_i\right\rangle\left\langle\psi^0_i\right|\right)\psi^{(k)}_n\\&=\left(I-\left|\psi^0_n\right\rangle\left\langle\psi^0_n\right|\right)\psi^{(k)}_n=\psi^{(k)}_n\end{aligned} \tag{568}$$

ahol felhasználtuk, hogy $\psi_n^{(k)}$ $(k \neq 0)$ ortogonális a ψ_n^0 sajátvektorra. A sajátvektor k-ik korrekciója az alábbi módon kifejezhető az alacsonyabb rendű sajátérték és sajátvektor korrekciók ismeretében,

$$\psi_n^{(k)} = -Q_n W \, \psi_n^{(k-1)} + \sum_{l=1}^{k-1} \varepsilon_n^{(l)} Q_n \psi_n^{(k-l)} \, . \tag{569}$$

A fenti egyenlet jobboldalának második tagjában az $l = k$ tagot elhagytuk, hiszen $Q_n \psi_n^0 = 0$. Innen kapjuk a sajátvektor elsőrendű korrekcióját,

$$\psi_n^{(1)} = -Q_n W \, \psi_n^0 = - \sum_{i(\neq n)} \frac{\langle \psi_i^0 | \, W \, | \psi_n^0 \rangle}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_n^0} \psi_i^0 \tag{570}$$

és az (553) egyenletből a sajátérték másodrendű korrekcióját,

$$\underline{\varepsilon_n^{(2)}} = \left\langle \psi_n^0 | W | \psi_n^{(1)} \right\rangle \tag{571}$$

$$= \underline{\sum_{i(\neq n)} \frac{| \, \langle \psi_i^0 | \, W \, | \psi_n^0 \rangle \, |^2}{\varepsilon_n^0 - \varepsilon_i^0}} \, . \tag{572}$$

Egy egyszerű példa

Vegyük a H_0 Hamilton-operátor két diszkrét állapotát ε_1^0 és ε_2^0 sajátenergiával és a legyen a W perturbáció olyan, hogy csak ezen két állapot között van zérustól különböző mátrixeleme, azaz

$$W_{nm} = W \, \delta_{1n} \delta_{2m} + W^* \, \delta_{2n} \delta_{1m} \, . \tag{573}$$

Amennyiben $\varepsilon_1^0 < \varepsilon_2^0$, a két energiaszint elsőrendű pertubációs korrekciója nyilvánvalóan zérus. A másodrendű korrekciók:

$$\varepsilon_1^{(2)} = \frac{|W|^2}{\varepsilon_1^0 - \varepsilon_2^0} < 0 \quad \text{és} \quad \varepsilon_2^{(2)} = \frac{|W|^2}{\varepsilon_2^0 - \varepsilon_1^0} = -\varepsilon_1^{(2)} > 0 \, , \tag{574}$$

azaz a szintek közötti energiakülönbség nő (szint-taszítás).

A perturbáció speciális alakja miatt egzaktan is megkaphatjuk a sajátenergiákat. Ehhez a

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_1^0 & W \\ W^* & \varepsilon_2^0 \end{pmatrix} \tag{575}$$

mátrixot kell diagonalizálni. A

$$\left(\varepsilon_1^0 - \varepsilon \right) \left(\varepsilon_2^0 - \varepsilon \right) - |W|^2 = \varepsilon^2 - \left(\varepsilon_1^0 + \varepsilon_2^0 \right) \varepsilon + \varepsilon_1^0 \varepsilon_2^0 - |W|^2 = 0 \tag{576}$$

egyenlet megoldásai

$$\begin{aligned} \varepsilon_{12} &= \frac{\varepsilon_1^0 + \varepsilon_2^0}{2} \pm \sqrt{\frac{\left(\varepsilon_1^0 + \varepsilon_2^0 \right)^2}{4} - \varepsilon_1^0 \varepsilon_2^0 + |W|^2} \\ &= \frac{\varepsilon_1^0 + \varepsilon_2^0}{2} \pm \sqrt{\frac{\left(\varepsilon_1^0 - \varepsilon_2^0 \right)^2}{4} + |W|^2} \, . \end{aligned} \tag{577}$$

Fejtsük sorba a megoldásokat a perturbáció $|W|$ erőssége szerint másodrendig:

$$\varepsilon_{12} = \frac{\varepsilon_1^0 + \varepsilon_2^0}{2} \pm \frac{|\varepsilon_1^0 - \varepsilon_2^0|}{2}\sqrt{1 + \frac{4|W|^2}{(\varepsilon_1^0 - \varepsilon_2^0)^2}}$$
$$\simeq \frac{\varepsilon_1^0 + \varepsilon_2^0}{2} \pm \frac{|\varepsilon_1^0 - \varepsilon_2^0|}{2}\left(1 - \frac{2|W|^2}{(\varepsilon_1^0 - \varepsilon_2^0)^2}\right) . \tag{578}$$

azaz

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_1^0 + \frac{|W|^2}{\varepsilon_1^0 - \varepsilon_2^0} = \varepsilon_1^0 - \frac{|W|^2}{\varepsilon_2^0 - \varepsilon_1^0} \tag{579}$$

és

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_2^0 + \frac{|W|^2}{\varepsilon_2^0 - \varepsilon_1^0}. \tag{580}$$

Az eredmény tehát megegyezik azzal, amit a másodrendű perturbációszámítással kaptunk. A feladat jól példázza, hogy a perturbációszámítás akkor alkalmazható, ha $|W| \ll |\varepsilon_1^0 - \varepsilon_2^0|$, azaz a W perturbáció mátrixeleme jóval kisebb a diszkrét energiaszintek különbségénél.

Elsőrendű Stark-effektus

A hidrogénatom elfajult nívóinak felhasadása homogén elektromos tér jelenlétében. Példaként tekintsük a négyszeresen elfajult $n = 2$ nívóját. A nulladrendű hullámfüggvények:

$$\psi_{200}(\underline{r}) = \frac{2}{(2a_0)^{3/2}}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} Y_0^0(\vartheta, \varphi) , \tag{581}$$

$$\psi_{21m}(\underline{r}) = \frac{2}{\sqrt{3}(2a_0)^{3/2}} \frac{r}{2a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} Y_1^m(\vartheta, \varphi) , \tag{582}$$

ahol

$$Y_0^0(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} , Y_1^0(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\vartheta) , \tag{583}$$

$$Y_1^{-1}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\vartheta) e^{-i\varphi} , Y_1^1(\vartheta, \varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\vartheta) e^{i\varphi} , \tag{584}$$

A perturbáció operátora z irányú elektromos tér esetén:

$$V(\underline{r}) = -q\overrightarrow{\mathcal{E}}\overrightarrow{r} = e\mathcal{E} r \cos\vartheta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} e\mathcal{E} r Y_1^0(\vartheta, \varphi) \tag{585}$$

A perturbáció mátrixelemeiben vizsgáljuk a térszög szerinti integrálokat:

$$\langle\psi_{200}|V|\psi_{200}\rangle \Longrightarrow \int_0^\pi \sin\vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi\, Y_0^0(\vartheta, \varphi)^* Y_1^0(\vartheta, \varphi)\, Y_0^0(\vartheta, \varphi) \tag{586}$$

$$= \sqrt{\frac{3}{\pi}} \int_0^\pi \sin\vartheta d\vartheta \cos\vartheta = \sqrt{\frac{3}{\pi}} \int_{-1}^1 x dx = 0 \tag{587}$$

$$\langle\psi_{200}|V|\psi_{21m}\rangle \Longrightarrow \int_0^\pi \sin\vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi\, Y_0^0(\vartheta, \varphi)^* Y_1^0(\vartheta, \varphi)\, Y_1^m(\vartheta, \varphi) \tag{588}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int_0^\pi \sin\vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi\, Y_1^0(\vartheta, \varphi)\, Y_1^m(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \delta_{m0} \tag{589}$$

a gömbharmonikusok ortonormáltsága miatt. A maradék mátrixelemeiben először a φ-szerinti integrált vizsgálva:

$$\langle\psi_{21m}|V|\psi_{21m'}\rangle \Longrightarrow \int_0^\pi \sin\vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi\, Y_1^m(\vartheta,\varphi)^* Y_1^0(\vartheta,\varphi)\, Y_1^{m'}(\vartheta,\varphi) \tag{590}$$

$$\approx \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m'-m)\varphi} = 2\pi\delta_{mm'} \tag{591}$$

így csak a $\langle\psi_{21m}|V|\psi_{21m}\rangle$ mátrixelemeket kell kiszámítani:

$$\langle\psi_{210}|V|\psi_{210}\rangle \approx \int_0^\pi \cos^3\vartheta \sin\vartheta d\vartheta = \int_{-1}^1 x^3 dx = 0 \tag{592}$$

$$\langle\psi_{211}|V|\psi_{211}\rangle \approx \int_0^\pi \sin^2\vartheta \cos\vartheta \sin\vartheta d\vartheta = \int_{-1}^1 \left(1-x^2\right) x dx = 0 \tag{593}$$

hiszen mindkét esetben páratlan függvényt integráltunk a $[-1,1]$ tatományon.

Az egyetlen zérustól különböző mátrixelem tehát:

$$\begin{aligned} V \equiv V_{200,210} &= \frac{4}{3(2a_0)^3} e\mathcal{E} \int_0^\infty dr \left(1-\frac{r}{2a_0}\right)\frac{r}{2a_0} r^3 e^{-\frac{r}{a_0}} \\ &= \frac{8}{3} a_0 e\mathcal{E} \int_0^\infty dx x^4 (1-x)\, e^{-2x} \\ &= \frac{8}{3} a_0 e\mathcal{E} \left(\frac{24}{32} - \frac{120}{64}\right) = -3a_0 e\mathcal{E} \end{aligned} \tag{594}$$

ugyanis

$$\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x} dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}} \quad . \tag{595}$$

A szekuláris mátrix (a hullámfüggvényeket $(200)\,,(21-1)\,,(210)\,,(211)$ sorrendben írva:

$$\begin{pmatrix} \lambda & 0 & -V & 0 \\ 0 & \lambda & 0 & 0 \\ -V & 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda \end{pmatrix} \quad , \tag{596}$$

melynek sajátértékei $\{\lambda, V+\lambda, \lambda-V\}$. Következésképpen az elsőrendű energiakorrekciók:

$$\Delta E^{(1)}_{200,210} = \begin{cases} -V = 3a_0 e\mathcal{E} \\ V = -3a_0 e\mathcal{E} \end{cases} \quad , \quad \Delta E^{(1)}_{211} = \Delta E^{(1)}_{21-1} = 0 \quad , \tag{597}$$

azaz *a perturbációszámítás első rendjében az eredetileg négyszeresen elfajult nívó egy (változatlan energiájú) kétszeresen elfajult nívóra és két szimmetrikusan elhelyezkedő, egyszeresen elfajult nívóra hasad fel.*

11. Pauli-egyenlet

Spin-operátorok mátrixábrázolása: $j=\frac{1}{2}$

$$S_i \in L\left(\mathbb{C}^2,\mathbb{C}^2\right) \tag{598}$$

$$S_i=\frac{\hbar}{2}\sigma_i \tag{599}$$

Pauli mátrixok

$$\sigma_x=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y=\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_x=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{600}$$

$$[\sigma_i,\sigma_j]=2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k \Longrightarrow [S_i,S_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}S_k \tag{601}$$

A spin-operátorok hatása a spinortéren:

$$\chi \in \mathbb{C}^2 \tag{602}$$

$$\chi_1=\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \chi_2=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{603}$$

$$\chi=c_1\chi_1+c_2\chi_2=\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{604}$$

$$S_i\chi_1=\begin{pmatrix} S_i^{11} & S_i^{12} \\ S_i^{21} & S_i^{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} S_i^{11} \\ S_i^{21} \end{pmatrix} \tag{605}$$

$$S_i\chi_2=\begin{pmatrix} S_i^{11} & S_i^{12} \\ S_i^{21} & S_i^{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} S_i^{12} \\ S_i^{22} \end{pmatrix} \tag{606}$$

$$\Downarrow$$

$$S_i\chi=c_1S_i\chi_1+c_2S_i\chi_2=\begin{pmatrix} S_i^{11}c_1+S_i^{12}c_2 \\ S_i^{21}c_1+S_i^{22}c_2 \end{pmatrix} \tag{607}$$

$$=\begin{pmatrix} S_i^{11} & S_i^{12} \\ S_i^{21} & S_i^{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{608}$$

Hullámfüggvények a *tenzorszorzat Hilbert-téren*

$$\psi \in \mathcal{L}^2\left(\mathbb{R}^3\right)\otimes\mathbb{C}^2=\mathcal{H} \tag{609}$$

$$\psi\left(\overrightarrow{r}\right)=\begin{pmatrix} \psi_1\left(\overrightarrow{r}\right) \\ \psi_2\left(\overrightarrow{r}\right) \end{pmatrix} \tag{610}$$

Skalárszorzat

$$\langle\psi|\varphi\rangle=\int d^3r\,\psi\left(\overrightarrow{r}\right)^\dagger\varphi\left(\overrightarrow{r}\right)=\int d^3r\,\psi_1\left(\overrightarrow{r}\right)^*\varphi_1\left(\overrightarrow{r}\right)+\int d^3r\,\psi_2\left(\overrightarrow{r}\right)^*\varphi_2\left(\overrightarrow{r}\right) \tag{611}$$

Operátorok kiterjesztése:

$$A \in L\left(\mathcal{L}^2\left(\mathbb{R}^3\right),\mathcal{L}^2\left(\mathbb{R}^3\right)\right) \tag{612}$$

$$\Downarrow$$

$$A\otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2}\in L\left(\mathcal{L}^2\left(\mathbb{R}^3\right),\mathcal{L}^2\left(\mathbb{R}^3\right)\right) \tag{613}$$

$$\left(A\otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2}\right)\left(\psi_1\otimes\chi_1+\psi_2\otimes\chi_2\right)=A\psi_1\otimes\chi_1+A\psi_2\otimes\chi_2 \tag{614}$$

illetve szokásos mátrixalakban:

$$\begin{pmatrix} A & 0\\ 0 & A\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}A\psi_1\\ A\psi_2\end{pmatrix}, \tag{615}$$

valamint

$$\mathbf{1}_{\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)}\otimes S_i\in L\left(\mathcal{L}^2\left(\mathbb{R}^3\right)\otimes\mathbb{C}^2,\mathcal{L}^2\left(\mathbb{R}^3\right)\otimes\mathbb{C}^2\right)$$

$$\left(\mathbf{1}_{\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)}\otimes S_i\right)\psi=\begin{pmatrix}S_i^{11} & S_i^{12}\\ S_i^{21} & S_i^{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}S_i^{11}\psi_1+S_i^{12}\psi_2\\ S_i^{21}\psi_1+S_i^{22}\psi_2\end{pmatrix}. \tag{616}$$

Következmény: $A\otimes\mathbf{1}_{\mathbb{C}^2}$ és $\mathbf{1}_{\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)}\otimes S_i$ operátorok felcserélhetőek

$$\begin{pmatrix} A & 0\\ 0 & A\end{pmatrix}\begin{pmatrix}S_i^{11} & S_i^{12}\\ S_i^{21} & S_i^{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}AS_i^{11}\psi_1+AS_i^{12}\psi_2\\ AS_i^{21}\psi_1+AS_i^{22}\psi_2\end{pmatrix} \tag{617}$$

$$=\begin{pmatrix}S_i^{11}A\psi_1+S_i^{12}A\psi_2\\ S_i^{21}A\psi_1+S_i^{22}A\psi_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}S_i^{11} & S_i^{12}\\ S_i^{21} & S_i^{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A\psi_1\\ A\psi_2\end{pmatrix} \tag{618}$$

$$=\begin{pmatrix}S_i^{11} & S_i^{12}\\ S_i^{21} & S_i^{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} A & 0\\ 0 & A\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} \tag{619}$$

<u>Hamilton operátor</u>

$$H=H_0\otimes\mathbf{1}_{\mathbb{C}^2}+\mathbf{1}_{\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)}\otimes\frac{g\mu_B}{\hbar}\vec{B}\vec{S}, \tag{620}$$

ahol a spin giromágneses faktora:

$$g=2\,. \tag{621}$$

Mátrixalakban:

$$H=\begin{pmatrix}H_0+\mu_B\vec{B}\vec{\sigma}^{11} & \mu_B\vec{B}\vec{\sigma}^{12}\\ \mu_B\vec{B}\vec{\sigma}^{21} & H_0+\mu_B\vec{B}\vec{\sigma}^{22}\end{pmatrix} \tag{622}$$

Tömör írásmód (*a fentiek tudatában!*):

$$H=\frac{p^2}{2m}+V\left(\vec{r}\right)+\mu_B\vec{B}\frac{1}{\hbar}\left(\vec{L}+g\vec{S}\right) \tag{623}$$

<u>Pauli-egyenlet</u>

$$i\hbar\partial_t\psi\left(\vec{r},t\right)=H\psi\left(\vec{r},t\right) \tag{624}$$

$$\Downarrow$$

$$i\hbar\begin{pmatrix}\partial_t\psi_1\left(\vec{r},t\right)\\ \partial_t\psi_2\left(\vec{r},t\right)\end{pmatrix}=$$

$$=\begin{pmatrix}\frac{p^2}{2m}+V\left(\vec{r}\right)+\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{B}\vec{L}+\mu_B\vec{B}\vec{\sigma}^{11} & \mu_B\vec{B}\vec{\sigma}^{12}\\ \mu_B\vec{B}\vec{\sigma}^{21} & \frac{p^2}{2m}+V\left(\vec{r}\right)+\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{B}\vec{L}+\mu_B\vec{B}\vec{\sigma}^{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\left(\vec{r},t\right)\\ \psi_2\left(\vec{r},t\right)\end{pmatrix} \tag{625}$$

z irányú (homogén) mágneses tér esetén:

$$i\hbar\begin{pmatrix}\partial_t\psi_1(\vec{r},t)\\ \partial_t\psi_2(\vec{r},t)\end{pmatrix}=$$

$$=\begin{pmatrix}\frac{p^2}{2m}+V(\vec{r})+\frac{\mu_B}{\hbar}BL_z+\mu_B B & 0\\ 0 & \frac{p^2}{2m}+V(\vec{r})+\frac{\mu_B}{\hbar}BL_z-\mu_B B\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1(\vec{r},t)\\ \psi_2(\vec{r},t)\end{pmatrix} \quad (626)$$

$$\Downarrow$$

$$i\hbar\partial_t\psi_1(\vec{r},t)=\left(\frac{p^2}{2m}+V(\vec{r})+\frac{\mu_B}{\hbar}BL_z+\mu_B B\right)\psi_1(\vec{r},t) \quad (627)$$

$$i\hbar\partial_t\psi_2(\vec{r},t)=\left(\frac{p^2}{2m}+V(\vec{r})+\frac{\mu_B}{\hbar}BL_z-\mu_B B\right)\psi_2(\vec{r},t) \quad (628)$$

Valószínűségsűrűség

$$\rho(\vec{r},t)=\psi^\dagger(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t)=|\psi_1(\vec{r},t)|^2+|\psi_2(\vec{r},t)|^2 \quad (629)$$

A spin időfejlődése

$$\frac{dS_i}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[S_i,H]=\frac{g\mu_B}{i\hbar^2}[S_i,S_j]\,B_j \quad (630)$$

$$=\frac{g\mu_B}{\hbar}\varepsilon_{ijk}B_jS_k=-\left(\vec{B}\times\vec{M}_S\right)_i \quad (631)$$

$$\underline{\frac{d\vec{S}}{dt}=\vec{M}_S\times\vec{B}} \quad (632)$$

ahol

$$\vec{M}_S=-g\mu_B\frac{1}{\hbar}\vec{S} \quad (633)$$

A pályamomentum időfejlődése

$$\frac{dL_i}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[L_i,H]=\frac{1}{i\hbar}[L_i,V]+\frac{\mu_B}{i\hbar^2}[L_i,L_j]\,B_j \quad (634)$$

$$=-\left[\vec{r}\times\vec{\nabla},V\right]_i+\frac{\mu_B}{\hbar}\varepsilon_{ijk}B_jL_k=\left[\vec{r}\times\left(-\vec{\nabla}V\right)+\left(\vec{M}_L\times\vec{B}\right)\right]_i \quad (635)$$

$$\underline{\frac{d\vec{L}}{dt}=\vec{r}\times\left(-\vec{\nabla}V\right)+\vec{M}_L\times\vec{B}} \quad (636)$$

ahol

$$\vec{M}_L=-\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{L} \quad (637)$$

Teljes impulzusmomentum

$$\vec{J}=\vec{L}+\vec{S} \quad (638)$$

$$\underline{\frac{d\vec{J}}{dt}=\vec{r}\times\left(-\vec{\nabla}V\right)+\vec{M}\times\vec{B}} \quad (639)$$

$$\vec{M}=\vec{M}_L+\vec{M}_S \quad (640)$$

12. Időfüggő perturbációszámítás

Hamilton operátor időfüggő perturbációval:

$$H(t) = H_0 + W(t) \tag{641}$$

A perturbálatlan Hamilton operátor sajátfüggvényei

$$H_0 \varphi_n = \varepsilon_n \varphi_n \tag{642}$$

$$\varphi_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}\, \varphi_n \tag{643}$$

A perturbált rendszer időfüggő Schrödinger egyenlete

$$i\hbar \partial_t \psi(t) = (H_0 + W(t))\, \psi(t) \tag{644}$$

Határfeltétel

$$\lim_{t\to 0} \psi(t) = \varphi_i \tag{645}$$

Kifejtés a H_0 sajátállapotai szerint:

$$\psi(t) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}\, c_n(t)\; \varphi_n \tag{646}$$

és a határfeltétel

$$c_n(0) = \delta_{in}\ . \tag{647}$$

A kifejtést behelyettesítve az időfüggő Schrödinger egyenletbe

$$\sum_n (\varepsilon_n\, c_n(t) + i\hbar \dot{c}_n(t))\; e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}\, \varphi_n = \sum_n (\varepsilon_n + W(t))\, c_n(t)\; e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}\, \varphi_n \tag{648}$$

$$\Downarrow$$

$$\sum_n i\hbar \dot{c}_n(t)\; e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}\, \varphi_n = \sum_n c_n(t)\; e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}\, W(t)\, \varphi_n \tag{649}$$

majd kihasználva a perturbálatlan stacionárius sajátfüggvények ortonormáltságát

$$i\hbar \dot{c}_k(t)\; e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k t} = \sum_n W_{kn}(t)\, c_n(t)\; e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t} \tag{650}$$

illetve

$$\underline{i\hbar \dot{c}_k(t) = \sum_n W_{kn}(t)\; c_n(t)\; e^{i\omega_{kn} t}} \tag{651}$$

ahol

$$W_{kn}(t) = \langle \varphi_k |\, W(t)\, | \varphi_n \rangle \tag{652}$$

és

$$\omega_{kn} = \frac{\varepsilon_k - \varepsilon_n}{\hbar} \tag{653}$$

A differenciálegyenletet kiintegrálva

$$c_k(t) = c_k(0) - \frac{i}{\hbar}\sum_n \int_0^t W_{kn}(\tau)\, c_n(\tau)\, e^{i\omega_{kn}\tau}\, d\tau \tag{654}$$

Megoldás szukcesszív approximációval

$$c_k^{(r+1)}(t) = c_k^{(r)}(0) - \frac{i}{\hbar}\sum_n \int_0^t W_{kn}(\tau)\, c_n^{(r)}(\tau)\, e^{i\omega_{kn}\tau}\, d\tau \quad (r = 0, 1, 2, \ldots) \tag{655}$$

Nulladik közelítés:

$$c_k^{(0)}(t) = c_k(0) = \delta_{ik} \Longleftrightarrow \psi^{(0)}(t) = \varphi_i(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_i t}\, \varphi_i \tag{656}$$

<u>Elsőrendű megoldás</u>

$$\underline{c_k^{(1)}(t) = \delta_{ik} - \frac{i}{\hbar}\int_0^t W_{ki}(\tau)\, e^{i\omega_{ki}\tau}\, d\tau} \tag{657}$$

<u>Átmeneti valószínűség</u> $k \neq i$

$$\underline{P_{i\to k}^{(1)}(t)} = \left|\left\langle \varphi_k | \psi^{(1)}(t)\right\rangle\right|^2 = \left|c_k^{(1)}(t)\right|^2 = \underline{\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t W_{ki}(\tau)\, e^{i\omega_{ki}\tau}\, d\tau\right|^2} \tag{658}$$

Időben periodikusan változó potenciál, pl. elektromos tér

$$W(\vec{r}, t) = e\,\vec{E}\,\vec{r}\cos\omega t = W(\vec{r})\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right) \tag{659}$$

$$W(\vec{r}) = \frac{e\,\vec{E}\,\vec{r}}{2} \tag{660}$$

$$W_{ki}(t) = W_{ki}\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right) \tag{661}$$

$$W_{ki} = \langle \varphi_k | W | \varphi_i \rangle = \frac{e\,\vec{E}}{2}\,\langle \varphi_k | \vec{r} | \varphi_i \rangle = \frac{e\,\vec{E}}{2}\,\langle \vec{r}\rangle_{ki} \tag{662}$$

$$\int_0^t W_{ki}(\tau)\, e^{i\omega_{ki}\tau}\, d\tau = W_{ki}\int_0^t \left(e^{i[\omega_{ki}+\omega]\tau} + e^{i[\omega_{ki}-\omega]\tau}\right) d\tau \tag{663}$$

$$= W_{ki}\left(\frac{e^{i[\omega_{ki}+\omega]t} - 1}{i(\omega_{ki}+\omega)} + \frac{e^{i[\omega_{ki}-\omega]t} - 1}{i(\omega_{ki}-\omega)}\right) \tag{664}$$

$$= W_{ki}\left(e^{i[\omega_{ki}+\omega]t/2}\frac{\sin[(\omega_{ki}+\omega)t/2]}{(\omega_{ki}+\omega)/2} + e^{i[\omega_{ki}-\omega]t/2}\frac{\sin[(\omega_{ki}-\omega)t/2]}{(\omega_{ki}-\omega)/2}\right) \tag{665}$$

$$P_{i\to k}^{(1)}(t) = \frac{|W_{ki}|^2}{\hbar^2}\left|e^{i[\omega_{ki}+\omega]t/2}\frac{\sin[(\omega_{ki}+\omega)t/2]}{(\omega_{ki}+\omega)/2} + e^{i[\omega_{ki}-\omega]t/2}\frac{\sin[(\omega_{ki}-\omega)t/2]}{(\omega_{ki}-\omega)/2}\right|^2 \tag{666}$$

Ha $t \gg 1/\omega$, $P_{i\to k}^{(1)}(t)$ két éles maximumot mutat $\omega_{ki} = \mp\omega$ értékeknél:

$$P_{i\to k}^{(1)}(t) \simeq \frac{|W_{ki}|^2}{\hbar^2}\left(\frac{\sin^2[(\omega_{ki}+\omega)t/2]}{[(\omega_{ki}+\omega)/2]^2} + \frac{\sin^2[(\omega_{ki}-\omega)t/2]}{[(\omega_{ki}-\omega)/2]^2}\right) \tag{667}$$

A maximumok és a legközelebbi csúcsok távolsága:

$$\omega_{ki} = \mp\omega + \Delta\omega_{ki} \longrightarrow \frac{\Delta\omega_{ki}\, t}{2} \sim \frac{3\pi}{2} \to \Delta E_{ki}\, t \sim 3\pi\hbar \tag{668}$$

azaz *a kiinduló és végállapot energiakülönbségének bizonytalansága,* $\Delta E_{ki} = E_k - E_i \pm \hbar\omega$, *és a perturbáció időtartama (mérési idő) között a Heisenberg-féle határozatlansági relációnak megfelelő kapcsolat áll fönn.*

Mi a helyzet $t \to \infty$ közelítésben?

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(\alpha t)}{\alpha^2 t} d\alpha \underset{y=\alpha t}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 y}{y^2} dy = \pi \to \lim_{t\to\infty} \frac{\sin^2(\alpha t)}{\pi\alpha^2 t} = \delta(\alpha) \tag{669}$$

$$\Downarrow$$

$$P_{i\to k}^{(1)}(t) \simeq \frac{|W_{ki}|^2}{\hbar^2} \left(\frac{\sin^2[(\omega_{ki}+\omega)t/2]}{[(\omega_{ki}+\omega)/2]^2 t} + \frac{\sin^2[(\omega_{ki}-\omega)t/2]}{[(\omega_{ki}-\omega)/2]^2 t} \right) t \tag{670}$$

$$\longrightarrow \frac{|W_{ki}|^2}{\hbar^2}\pi \left[\delta\left(\frac{1}{2\hbar}[\varepsilon_k - \varepsilon_i + \hbar\omega] \right) + \delta\left(\frac{1}{2\hbar}[\varepsilon_k - \varepsilon_i - \hbar\omega] \right) \right] t \tag{671}$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} |W_{ki}|^2 \left[\delta(\varepsilon_k - \varepsilon_i + \hbar\omega) + \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_i - \hbar\omega) \right] t \tag{672}$$

$$\varepsilon_k \approx \varepsilon_i + \hbar\omega \to \text{abszorpció} \tag{673}$$

$$\varepsilon_k \approx \varepsilon_i - \hbar\omega \to \text{indukált emisszió} \tag{674}$$

Fermi-féle aranyszabály

$$\underline{P_{i\to k}^{(1)}(t) \approx w_{i\to k}\, t} \tag{675}$$

ahol az időegységre jutó átmeneti valószínűség

$$\underline{w_{i\to k} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{ki}|^2 \left(\delta(\varepsilon_k - \varepsilon_i + \hbar\omega) + \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_i - \hbar\omega) \right)} \tag{676}$$

A $t = 0$ időpillanatban bekapcsolt konstans perturbáció esetén, $W(\overrightarrow{r}, t) = W(\overrightarrow{r})\,\Theta(t)$, a fenti levezetés leegyszerűsödik:

$$W_{ki} \int_0^t e^{i\omega_{ki}\tau}\, d\tau = W_{ki} \frac{e^{i\omega_{ki}t} - 1}{i\omega_{ki}} = W_{ki} e^{i\omega_{ki}t/2} \frac{\sin[(\omega_{ki})t/2]}{\omega_{ki}/2} \tag{677}$$

$$\Downarrow$$

$$P_{i\to k}^{(1)}(t) \simeq \frac{|W_{ki}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2[\omega_{ki}t/2]}{[\omega_{ki}/2]^2} \tag{678}$$

$$\Downarrow$$

$$\underline{w_{i\to k} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{ki}|^2\, \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_i)} \tag{679}$$

azaz elsőrendben csak azonos energiájú állapotok között történik átmenet.

Annak valószínűségét, hogy a rendszer az i-ik állapotból valamely másik állapotba jut, a végállapotokra való öszegzéssel kapjuk meg:

$$P_i^{(1)}(t) = \sum_{k\,(\neq i)} P_{i\to k}^{(1)}(t) \approx w_i\, t\,, \tag{680}$$

ahol w_i az i-ik állapot teljes átmeneti rátája:

$$w_i = \sum_{k\,(\neq i)} w_{i\to k}\,. \tag{681}$$

Sűrű (folytonos) spektrum, pl. szórási állapotok vagy szilárdtestek sávjai esetén az i-ik állapot teljes átmeneti rátája:

$$w_i = \sum_{k\,(\neq i)} w_{i\to k} = \int \sum_{k\,(\neq i)} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)\, w_{i\to k}\, d\varepsilon \tag{682}$$

Azzal a közelítéssel élve, hogy $w_{i\to k}$ helyettesíthető az ε_k energiájú állapotokon vett átlaggal:

$$\langle w_{i\to k}\rangle = w_i(\varepsilon_k) = \begin{cases} \frac{2\pi}{\hbar}\left|W_i(\varepsilon_k)\right|^2 \left(\delta(\varepsilon_k - \varepsilon_i + \hbar\omega) + \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_i - \hbar\omega)\right) \\ \frac{2\pi}{\hbar}\left|W_i\right|^2 \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_i) \end{cases} \tag{683}$$

$$w_i = \int w_i(\varepsilon) \sum_{k\,(\neq i)} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)\, d\varepsilon = \int w_i(\varepsilon)\, D(\varepsilon)\, d\varepsilon \tag{684}$$

ahol bevezettük a folytonos spektrum állapotsűrűségét:

$$D(\varepsilon) = \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \tag{685}$$

Összefoglalva:

$$w_i = \begin{cases} \frac{2\pi}{\hbar}\left(\left|W_i(\varepsilon_i - \hbar\omega)\right|^2 D(\varepsilon_i - \hbar\omega) + \left|W_i(\varepsilon_i + \hbar\omega)\right|^2 D(\varepsilon_i + \hbar\omega)\right) \\ \frac{2\pi}{\hbar}\left|W_i\right|^2 D(\varepsilon_i) \end{cases} \tag{686}$$

Dipólátmenetek kiválasztási szabályai H-atomra

$$x = r\sin\vartheta\cos\varphi = \frac{r}{2}\sin\vartheta\left(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}\right) \tag{687}$$

$$y = r\sin\vartheta\sin\varphi = \frac{r}{2i}\sin\vartheta\left(e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}\right) \tag{688}$$

$$z = r\cos\vartheta \tag{689}$$

$$\varphi_{n\ell m} \simeq \frac{1}{r} L_{n\ell}(2r/r_0)\, e^{-r/r_0}\, A_\ell^m\, P_{\ell m}(\cos\vartheta)\, e^{im\varphi} \tag{690}$$

ahol $L_{n\ell}(x)$ az asszociált Laguerre-polinomokat, $P_{\ell m}(x) = \sin^{|m|}(\vartheta)\, P_\ell^{|m|}(\cos\vartheta)$ pedig az asszociált Legendre függvényeket jelöli.

$$\langle n'\ell' m'|\, x_i\, |n\ell m\rangle \propto \int_0^\infty L_{n'\ell'}(2r/r_0)\, L_{n\ell}(2r/r_0)\, r dr \tag{691}$$

a fenti integrálok zérustól különbözőek $\rightarrow$ a főkvantumszámra nincs kiválasztási szabály

$$\langle n'\ell'm'|\, x\,|n\ell m\rangle \propto \int_0^{2\pi} \left[e^{i(m-m'+1)\varphi} + e^{i(m-m'-1)\varphi}\right] d\varphi = \frac{1}{2\pi}\left(\delta_{m,m'-1} + \delta_{m,m'+1}\right) \rightarrow \underline{m' = m \pm 1} \tag{692}$$

$$\langle n'\ell'm'|\, y\,|n\ell m\rangle \propto \int_0^{2\pi} \left[e^{i(m-m'+1)\varphi} - e^{i(m-m'-1)\varphi}\right] d\varphi = \frac{1}{2\pi}\left(\delta_{m,m'-1} + \delta_{m,m'+1}\right) \rightarrow \underline{m' = m \pm 1} \tag{693}$$

$$\langle n'\ell'm'|\, z\,|n\ell m\rangle \propto \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi = \frac{1}{2\pi}\delta_{m-m'} \rightarrow \underline{m' = m} \tag{694}$$

Ezek a mágneses kvantumszámra vonatkozó kiválasztási szabályok.

Vizsgáljuk meg z irányú elektromos tér esetén a ϑ változó szerinti integrált:

$$\langle n'\ell'm'|\, z\,|n\ell m\rangle \propto \int_{-1}^{1} P_{\ell'm'}(\cos\vartheta)\, P_{\ell m}(\cos\vartheta)\cos\vartheta\, d(\cos\vartheta) \tag{695}$$

$$= \int_{-1}^{1} P_{\ell'm'}(x)\, P_{\ell m}(x)\, x dx \tag{696}$$

Fennáll a következő rekurziós összefüggés:

$$xP_{\ell m}(x) = \frac{\ell - m + 1}{2\ell + 1} P_{\ell+1,m}(x) + \frac{\ell + m}{2\ell + 1} P_{\ell-1,m}(x) \tag{697}$$

ezért $m' = m$ miatt az

$$\int_{-1}^{1} P_{\ell' m}(x)\, P_{\ell\pm1,m}(x)\, dx \propto \delta_{\ell',\ell\div1} \tag{698}$$

integrálok fordulnak elő, így leolvasható az $\underline{\ell' = \ell \pm 1}$ kiválasztási szabály. Ugyanez áll fenn az x és y mátrixelemeire is.

13. Azonos részecskékből álló rendszerek

13.1. Azonos részecskék rendszerének hullámfüggvénye

Egyrészecske hullámfüggvény spin-koordináta reprezentációban

$$\psi_1 \in \mathcal{L}^2\left(\mathbb{R}^3\right) \otimes \mathbb{C}^{2s+1} \Longrightarrow \psi_{m_1^s}\left(\overrightarrow{r}_1\right) \chi_{s,m_1^s} \equiv \psi_1\left(\overrightarrow{r}_1, m_1^s\right) \equiv \psi_1(1) \tag{699}$$

N azonos részecske hullámfüggvénye:

$$\psi_N \in \mathcal{H}_N = \underbrace{\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \ldots \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1}_{N-\text{szeres tenzorszorzat tér}} \Longrightarrow \psi_N(1, 2, \ldots, N) \tag{700}$$

Két részecske felcserélése:

$$P(i,j)\,\psi_N(\ldots, i, \ldots, j, \ldots) = \psi_N(\ldots, j, \ldots, i, \ldots) \tag{701}$$

$$P(i,j)^2 = I \tag{702}$$

$$P(i,j)\,\psi = k\psi \Longrightarrow k = \pm 1 \tag{703}$$

Azonosság elve

A megtalálási valószínűség invariáns két azonos részecske felcserélésére:

$$\langle\psi_N|\psi_N\rangle = \langle P(i,j)\,\psi_N|P(i,j)\,\psi_N\rangle \tag{704}$$

ill. bármely mérési eredmény is az:

$$\langle\psi_N|A|\psi_N\rangle = \langle P(i,j)\,\psi_N|A|P(i,j)\,\psi_N\rangle \tag{705}$$

ahol A tetszőleges hermitikus többrészecske operátor. Legyen $A = |\phi\rangle\langle\phi|$, ahol $\phi \in \mathcal{H}_N$. Ekkor

$$\langle\psi_N|\phi\rangle\langle\phi|\psi_N\rangle = \langle P(i,j)\,\psi_N|\phi\rangle\langle\phi|P(i,j)\,\psi_N\rangle\ , \tag{706}$$

amit írhatunk így is:

$$\langle\phi|\psi_N\rangle\langle\psi_N|\phi\rangle = \langle\phi|P(i,j)\,\psi_N\rangle\langle P(i,j)\,\psi_N|\phi\rangle\ . \tag{707}$$

Annak, hogy a fenti egyenlőség teszőleges ϕ-re teljesüljön, elégséges feltétel:

$$|\psi_N\rangle\langle\psi_N| = |P(i,j)\,\psi_N\rangle\langle P(i,j)\,\psi_N| \tag{708}$$

amiből következik, hogy

$$|\psi_N\rangle = \frac{\langle P(i,j)\,\psi_N|\psi_N\rangle}{\langle\psi_N|\psi_N\rangle} P(i,j)\,|\psi_N\rangle \tag{709}$$

azaz ψ_N sajátfüggvénye a $P(i,j)$ felcserélési operátornak:

$$P(i,j)\,|\psi_N\rangle = k\,|\psi_N\rangle \tag{710}$$

ahol $k = \langle\psi_N|\psi_N\rangle / \langle P(i,j)\,\psi_N|\psi_N\rangle$. Előbb bizonyítottuk, hogy k lehetséges értékei ± 1.

Osztályozás:

$$P(i,j)\,\psi_N = \begin{cases} \psi_N & \text{bozonok } (s = 0, 1, \ldots) \\ -\psi_N & \text{fermionok } \left(s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots\right) \end{cases} \tag{711}$$

Hamilton operátor és Schrödinger egyenlet

$$i\hbar\partial_t\psi_N = H_N\,\psi_N \tag{712}$$

$$i\hbar\partial_t P(i,j)\,\psi_N = P(i,j)\,H_N\psi_N = P(i,j)\,H_N P(i,j)\,P(i,j)\,\psi_N \tag{713}$$

Ugyanakkor a $\psi'_N = P(i,j)\,\psi_N = \pm\psi_N$ hullámfüggvény is megoldása a Schrödinger egyenletnek:

$$i\hbar\partial_t\psi'_N = H_N\,\psi'_N \Longrightarrow i\hbar\partial_t P(i,j)\,\psi_N = H_N P(i,j)\,\psi_N \tag{714}$$

$$\Downarrow$$

$$\left[H_N - P(i,j)\,H_N P(i,j)\right]\psi_N = 0 \tag{715}$$

$$\Downarrow$$

$$H_N = P(i,j)\,H_N P(i,j) \iff \left[P(i,j)\,,H_N\right] = 0 \tag{716}$$

Mit jelent a $P(i,j)\,H_N P(i,j)$ operátor?

$$P(i,j)\,H_N(i,j)\,P(i,j)\,\psi_N(i,j) = P(i,j)\left(H_N(i,j)\,\psi_N(j,i)\right) = H_N(j,i)\,\psi_N(i,j) \tag{717}$$

azaz

$$P(i,j)\,H_N(i,j)\,P(i,j) = H_N(j,i) \tag{718}$$

$$\Downarrow$$

$$H_N(i,j) = H_N(j,i) \tag{719}$$

tehát *az azonos részecskék Hamilton operátora szükségszerűen invariáns két részecske felcserélésére.*

Következmény: a hullámfüggvény permutációs szimmetriája mozgásállandó:

$$\frac{d}{dt}\langle\psi_N|P(i,j)\,|\psi_N\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi_N|\left[P(i,j)\,,H_N\right]|\psi_N\rangle = 0 \tag{720}$$

Pauli elv: Az elektronok fermionok, azaz egy többelektronos hullámfüggvény antiszimmetrikus a részecskék felcserélésére nézve.

Antiszimmetrikus hullámfüggvény konstrukciója: $\varphi_a, \varphi_b \in \mathcal{H}_1 = \mathcal{L}^2\left(\mathbb{R}^3\right) \otimes \mathbb{C}^2$

Tenzorszorzat hullámfüggvények:

$$\varphi_a(1) \otimes \varphi_a(2)\,, \varphi_b(1) \otimes \varphi_b(2)\,, \varphi_a(1) \otimes \varphi_b(2)\,, \varphi_b(1) \otimes \varphi_a(2) \tag{721}$$

egyszerűsített írásmóddal:

$$\varphi_a(1)\,\varphi_a(2)\,, \varphi_b(1)\,\varphi_b(2)\,, \varphi_a(1)\,\varphi_b(2)\,, \varphi_b(1)\,\varphi_a(2) \tag{722}$$

Általános hullámfüggvény:

$$\psi(1,2) = c_{aa}\,\varphi_a(1)\,\varphi_a(2) + c_{bb}\,\varphi_b(1)\,\varphi_b(2) + c_{ab}\,\varphi_a(1)\,\varphi_b(2) + c_{ba}\,\varphi_b(1)\,\varphi_a(2) \tag{723}$$

Két részecske felcserélése:

$$\psi(2,1) = c_{aa}\,\varphi_a(2)\,\varphi_a(1) + c_{bb}\,\varphi_b(2)\,\varphi_b(1) + c_{ab}\,\varphi_a(2)\,\varphi_b(1) + c_{ba}\,\varphi_b(2)\,\varphi_a(1) \tag{724}$$
$$= c_{aa}\,\varphi_a(1)\,\varphi_a(2) + c_{bb}\,\varphi_b(1)\,\varphi_b(2) + c_{ab}\,\varphi_b(1)\,\varphi_a(2) + c_{ba}\,\varphi_a(1)\,\varphi_b(2) \tag{725}$$

ugyanakkor

$$\begin{aligned}\psi(2,1) = -\psi(1,2) = &- c_{aa}\,\varphi_a(1)\,\varphi_a(2) - c_{bb}\,\varphi_b(1)\,\varphi_b(2)\\ &- c_{ab}\,\varphi_a(1)\,\varphi_b(2) - c_{ba}\,\varphi_b(1)\,\varphi_a(2)\end{aligned} \tag{726}$$

$$\Downarrow$$

$$c_{aa} = -c_{aa} = 0 \tag{727}$$
$$c_{bb} = -c_{bb} = 0 \tag{728}$$
$$c_{ab} = -c_{ba} \tag{729}$$

azaz

$$\psi(1,2) = \frac{\sqrt{2}}{2}\left(\varphi_a(1)\,\varphi_b(2) - \varphi_b(1)\,\varphi_a(2)\right) \tag{730}$$

ahol $\psi(1,2)$-t 1-re normáltuk. Ezt formálisan írhatjuk az alábbi determináns alakban:

$$\psi(1,2) = \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{vmatrix} \varphi_a(1) & \varphi_b(1) \\ \varphi_a(2) & \varphi_b(2) \end{vmatrix} \tag{731}$$

Általánosítás: $\varphi_{\alpha_1}, \varphi_{\alpha_2}, \ldots, \varphi_{\alpha_N} \in \mathcal{H}_1$ ortonormált függvények

$$\Psi^A_{\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N}(1,\ldots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{P(1,\ldots,N)}(-1)^P\,P(1,\ldots,N)\;\varphi_{\alpha_1}(1)\ldots\varphi_{\alpha_N}(N) \tag{732}$$

ahol $P(1,\ldots,N)$ az $(1,\ldots,N)$ természetes számok tetszőleges permutációja, melyben a felcserélések száma P.

Slater determináns:

$$\Psi^A_{\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N}(1,\ldots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \varphi_{\alpha_1}(1) & \varphi_{\alpha_2}(1) & \varphi_{\alpha_N}(1) \\ \varphi_{\alpha_1}(2) & \varphi_{\alpha_2}(2) & \varphi_{\alpha_N}(2) \\ & & \\ \varphi_{\alpha_1}(N) & \varphi_{\alpha_2}(N) & \varphi_{\alpha_N}(N) \end{vmatrix} \tag{733}$$

Pauli-féle kizárási elv: Az egyrészecske hullámfügvények tenzorszorzat terén konstruált N-fermion hullámfüggvényben mindegyik egyrészecske hullámfüggvény csak egyszer fordul elő (két fermion nem lehet ugyanabban az egyrészecske állapotban).

Általános hullámfüggvény: $\{\varphi_\alpha \in \mathcal{H}_1,\ \alpha \in \mathbb{N}\}$ TONR

$$\psi(1,\ldots,N) = \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N \in \mathbb{N} \\ (\alpha_l \neq \alpha_k)}} c_{\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N}\,\Psi^A_{\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N}(1,\ldots,N) \tag{734}$$

Bozonrendszer hullámfüggvénye

Nyilvánvaló, hogy az alábbi kétrészecske hullámfüggvények szimmetrikusak a két részecske felcserélésére:

$$\varphi_a(1)\,\varphi_a(2)\,,\ \varphi_b(1)\,\varphi_b(2)\ \text{ és } \frac{\sqrt{2}}{2}\left(\varphi_a(1)\,\varphi_b(2)+\varphi_b(1)\,\varphi_a(2)\right) \tag{735}$$

Következésképpen a bozonokra nem vonatkozik a Pauli kizárási elv, azaz az összes részecske lehet ugyanabban az egyrészecske állapotban (l. Bose kondenzáció a statisztikus fizikában).

Általános konstrukció:

$$\Psi^S_{\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N}(1,\ldots,N)=\sqrt{\frac{N_1!N_2!\ldots}{N!}}\sum_{P'(1,\ldots,N)}P'(1,\ldots,N)\,\varphi_{\alpha_1}(1)\ldots\varphi_{\alpha_N}(N) \tag{736}$$

ahol az azonos egyrészecske állapotok közötti permutációkat nem vesszük figyelembe, hiszen azzal nem kapunk új N-részecske hullámfüggvényt. Az $N_1, N_2\ldots$ számok éppen azt adják meg, hogy az azonos egyrészecske állapotok hányszor fordulnak elő a tenszorszorzatban. Az általános N-bozon állapot a szimmetrizált hullámfüggvények lineár-kombinációja:

$$\psi(1,\ldots,N)=\sum_{\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N\in\mathbb{N}}c_{\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N}\,\Psi^S_{\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N}(1,\ldots,N) \tag{737}$$

Betöltési szám reprezentáció

N számú azonos részecske, az egyrészecske hullámfüggvények egy teljes rendszerének tenzorszorzat terén (Fock-tér) a hullámfüggvények antiszimmetrizált, illetve szimmetrizált bázisát egyértelműen megadhatjuk úgy, hogy megmondjuk, hány részecske található valamely egyrészecske állapotban:

$$\left.\begin{matrix}\Psi^A_{\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N} & (\alpha_l\neq\alpha_k)\\ \\ \Psi^S_{\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N} & \end{matrix}\right\}=|n_1,n_2,\ldots,n_\alpha,\ldots\rangle \tag{738}$$

ahol a betöltési számok:

$$\begin{cases}\text{Fermionok} & n_{\alpha_1}=n_{\alpha_2}=\ \ldots\ =n_{\alpha_N}=1 \quad \text{egyébként} \quad n_\alpha=0\\ \\ \text{Bozonok} & n_\alpha=\sum_{k=1,\ldots,N}\delta_{\alpha,\alpha_k}\in\mathbb{N}_0\end{cases} \tag{739}$$

és természetesen teljesül, hogy a részecskék száma N :

$$\sum_{\alpha\in\mathbb{N}}n_\alpha=N\,. \tag{740}$$

Amennyiben az egyrészecske hullámfüggvények az egyrészecske Hamilton operátor sajátfüggvényei:

$$H_1\,\varphi_\alpha=\varepsilon_\alpha\,\varphi_\alpha \tag{741}$$

akkor $|n_1,n_2,\ldots,n_\alpha,\ldots\rangle$ a

$$H_N(1,\ldots,N)=H_1(1)+H_1(2)\ldots+H_1(N) \tag{742}$$

független N-részecske Hamilton-operátor sajátfüggvénye,

$$E_N=\sum_{\alpha\in\mathbb{N}}\varepsilon_\alpha n_\alpha \tag{743}$$

sajátértékkel. Ez nyilvánvalóan következik abból, hogy

$$\begin{aligned}
&(H_1(1) + H_1(2) \ldots + H_1(N)) [\varphi_{\alpha_1}(1) \otimes \ldots \otimes \varphi_{\alpha_N}(N)] \\
&= H_1(1) \varphi_{\alpha_1}(1) \otimes \ldots \otimes \varphi_{\alpha_N}(N) + \varphi_{\alpha_1}(1) \otimes H_1(2) \varphi_{\alpha_2}(2) \otimes \ldots \otimes \varphi_{\alpha_N}(N) + \\
&\quad \ldots + \varphi_{\alpha_1}(1) \otimes \ldots \otimes H_1(N) \varphi_{\alpha_N}(N) \\
&= (\varepsilon_{\alpha_1} + \varepsilon_{\alpha_2} + \ldots + \varepsilon_{\alpha_N}) [\varphi_{\alpha_1}(1) \otimes \ldots \otimes \varphi_{\alpha_N}(N)]
\end{aligned}$$