Szemelvények a Kvantummechanika 2 előadás anyagából

Szunyogh László

2018. október 30.

1. Impulzusmomentum összeadási szabályok

Legyen $\overrightarrow{J}_1$ és $\overrightarrow{J}_2$ két impulzusmomentum operátor, mely két különböző Hilbert-téren hat,

$$\overrightarrow{J}_i : H_i \to H_i \ , \ \overrightarrow{J}_i \times \overrightarrow{J}_i = i\hbar \overrightarrow{J}_i \ , \tag{1}$$

$$J_i^2 \,|\, j_i, m_i\rangle_i = \hbar^2 \, j_i \,(j_i+1) \ |j_i, m_i\rangle_i \ , \ J_{i,z}|\, j_i, m_i\rangle_i = \hbar m_i |\, j_i, m_i\rangle_i \ , \tag{2}$$

$$J_{i,\pm} \,|\, j_i, m_i\rangle = \hbar \sqrt{j_i\,(j_i+1) - \ m_i\,(m_i \pm 1)} \ |\, j_i, m_i \pm 1\rangle \ , \tag{3}$$

$$|\, j_i, m_i\rangle_i \in H_i \quad (i = 1,2) \ . \tag{4}$$

Terjesszük ki ezen operátorokat a két Hilbert-tér tenzorszorzatára:

$$\overrightarrow{J}_i : H_1 \otimes H_2 \to H_1 \otimes H_2 \ , \tag{5}$$

$$\overrightarrow{J}_1 \to \overrightarrow{J}_1 \otimes \mathbf{1}_2 \ , \ \overrightarrow{J}_2 \to \mathbf{1}_1 \otimes \overrightarrow{J}_2 \ . \tag{6}$$

Az impulzusmomentum sajátállapotok tenzorszorzatán (a $\otimes$ jelölést elhagyva) a $\overrightarrow{J}_1$ operátorok a következőképpen hatnak:

$$J_1^2 \,|\, j_1, m_1\rangle_1 |\, j_2, m_2\rangle_2 = \hbar^2 \, j_1\,(j_1+1) \ |\, j_1, m_1\rangle_1 |\, j_2, m_2\rangle_2 \ , \tag{7}$$

$$J_{1,z} |\, j_1, m_1\rangle_1 |\, j_2, m_2\rangle_2 = \hbar m_1 |\, j_1, m_1\rangle_1 |\, j_2, m_2\rangle_2 \ , \tag{8}$$

$$J_{1,\pm} \,|\, j_1, m_1\rangle_1 |\, j_2, m_2\rangle_2 = \hbar \sqrt{j_1\,(j_1+1) - \ m_1\,(m_1 \pm 1)} \ |\, j_1, m_1 \pm 1\rangle |\, j_2, m_2\rangle_2 \ , \tag{9}$$

és $\overrightarrow{J}_1$ hasonlóképpen. Nyilvánvaló, hogy az így definiált $\underline{J}_1$ és $\underline{J}_2$ operátorok felcserélhetők egymással és összegük,

$$\overrightarrow{J} = \overrightarrow{J}_1 + \overrightarrow{J}_2 \ , \tag{10}$$

is impulzusmomentum operátor, ugyanis:

$$\begin{aligned} \overrightarrow{J} \times \overrightarrow{J} &= \left(\overrightarrow{J}_1 + \overrightarrow{J}_2\right) \times \left(\overrightarrow{J}_1 + \overrightarrow{J}_2\right) \\ &= \overrightarrow{J}_1 \times \overrightarrow{J}_1 + \underbrace{\overrightarrow{J}_1 \times \overrightarrow{J}_2 + \overrightarrow{J}_2 \times \overrightarrow{J}_1}_{0} + \overrightarrow{J}_2 \times \overrightarrow{J}_2 \\ &= i\hbar \overrightarrow{J}_1 + i\hbar \overrightarrow{J}_2 = i\hbar \overrightarrow{J} \ . \end{aligned} \tag{11}$$

Az algebrai levezetés értelmében J^2 és J_z közös sajátfüggvényei és sajátértékei kielégítik a

$$J^2 \,|\, j,m\rangle = \hbar^2 \, j\,(j+1)\;|j,m\rangle \;,\;\; J_z|\,j,m\rangle = \hbar m|\,j,m\rangle \;, \tag{12}$$

$$J_\pm \,|\, j,m\rangle = \hbar \sqrt{j\,(j+1) - \; m\,(m \pm 1)}\;|\,j, m\pm 1\rangle \;, \tag{13}$$

$$|\,j,m\rangle \in H_1 \otimes H_2 \;, \tag{14}$$

összefüggéseket. A következőkben megmutatjuk, hogy milyen $|j,m\rangle$ sajátfüggvények állíthatók elő *adott* j_1 *és* j_2 *esetén* a $|\,j_1,m_1\rangle_1|\,j_2,m_2\rangle_2$ tenzorszorzat-függvények lineárkombinációjaként, azaz

$$|j,m\rangle = \sum_{m_1 m_2} C\,(j_1 m_1, j_2 m_2|j,m)\;|\,j_1,m_1\rangle_1|\,j_2,m_2\rangle_2 \tag{15}$$

alakban. A $C\,(j_1m_1, j_2m_2|j,m)$ együtthatókat, melyeket szokás $\langle j_1m_1, j_2m_2|j,m\rangle$-vel is jelölni, Clebsch-Gordan együtthatóknak nevezzük. Megállapodás szerint a Clebsch-Gordan együtthatókat valós értékűnek választjuk. Vegyük észre, hogy összesen $(2j_1+1)\,(2j_2+1)$ ilyen sajátállapot létezik, melyek - mint az ábrázoláselmélet igazolja - a J^2 és J_z határozott sajátaltereire (irreducibilis ábrázolásaira) esnek szét.

A J_z operátor hatása az (15) állapotra kifejezhető mint

$$\begin{aligned} J_z|\,j,m\rangle &= (J_{1,z} + J_{2,z}) \sum_{m_1,m_2} C\,(j_1m_1, j_2m_2|j,m)\;|\,j_1,m_1\rangle_1|\,j_2,m_2\rangle_2 \\ &= \sum_{m_1,m_2} \hbar\,(m_1+m_2)\,C\,(j_1m_1, j_2m_2|j,m)\;|\,j_1,m_1\rangle_1|\,j_2,m_2\rangle_2 \\ &= \hbar\,(m_1+m_2)\,|\,j,m\rangle \;, \end{aligned} \tag{16}$$

amiből

$$\boxed{m = m_1 + m_2} \tag{17}$$

következik. Tehát azok a Clebsch-Gordan együtthatók, melyekre $m \neq m_1 + m_2$, bizonyosan zérussal egyeznek meg. Ebből az is következik, hogy *adott* j_1 és j_2 mellett m maximálisan a j_1+j_2 értéket veheti föl, ezért j sem lehet ennél nagyobb, azaz $j > j_1 + j_2$ esetén $C\,(j_1m_1, j_2m_2|j,m)$ ugyancsak zérus.

Állítás:

$$|\,j_1+j_2, j_1+j_2\rangle = |\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2 \;, \tag{18}$$

azaz,

$$C\,(j_1j_1, j_2j_2|j_1+j_2, j_1+j_2) = 1 \;. \tag{19}$$

Bizonyítás:

Egyrészt

$$\begin{aligned} J_z|\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2 &= (J_{1,z}+J_{2,z})\,|\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2 \\ &= \hbar\,(j_1+j_2)\,|\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2 \;, \end{aligned} \tag{20}$$

másrészt a

$$\begin{aligned} J^2 &= (\underline{J}_1 + \underline{J}_2)^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2\underline{J}_1\underline{J}_2 \\ &= J_1^2 + J_2^2 + 2J_{1,z}\,J_{2,z} + J_{1,+}\,J_{2,-} + J_{1,-}\,J_{2,+} \;, \end{aligned} \tag{21}$$

azonosság felhasználásával,

$$\begin{aligned}J^2|\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2 &= \hbar^2\left(j_1\left(j_1+1\right)+j_2\left(j_2+1\right)+2j_1j_2\right)|\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2\\ &+\underbrace{J_{1,+}|\,j_1,j_1\rangle_1}_{|\,\rangle_0^1}J_{2,-}|j_2,j_2\rangle_2+J_{1,-}|\,j_1,j_1\rangle_1\underbrace{J_{2,+}|j_2,j_2\rangle_2}_{|\,\rangle_0^2}\\ &=\hbar^2\left(j_1+j_2\right)\left(j_1+j_2+1\right)|\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2\;,\end{aligned}\tag{22}$$

ahol $|\,\rangle_0^i$ a H_i Hilbert-tér nulleleme.

Vezessük be a $j_{\max}=j_1+j_2$ jelölést. Nyilvánvaló, hogy a $J_-=J_{1,-}+J_{2,-}$ operátort egymásután hattatva a $|\,j_{\max},j_{\max}\rangle$ állapotra, a $|\,j_{\max},m\rangle$ $(m=-j_{\max},-j_{\max}+1,\ldots,j_{\max}-1)$ állapotok előállíthatók.

Példa:

$$J_-|\,j_1+j_2,j_1+j_2\rangle=\hbar\sqrt{2\left(j_1+j_2\right)}|\,j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle\tag{23}$$

$$\left(J_{1,-}+J_{2,-}\right)|\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2=\hbar\sqrt{2j_1}|\,j_1,j_1-1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2+\hbar\sqrt{2j_2}|\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2-1\rangle_2\tag{24}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{aligned}|\,j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle=&\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}|\,j_1,j_1-1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2\\ &+\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}|\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2-1\rangle_2\;,\end{aligned}\tag{25}$$

azaz

$$C\left(j_1,j_1-1;j_2j_2|j_1+j_2,j_1+j_2-1\right)=\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\;,\tag{26}$$

valamint

$$C\left(j_1j_1;j_2,j_2-1|j_1+j_2,j_1+j_2-1\right)=\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}\;.\tag{27}$$

Nyilvánvaló, hogy a

$$\left(2j_1+1\right)\left(2j_2+1\right)=2\left(j_1+j_2\right)+1\tag{28}$$

egyenlőség csak akkor teljesül, ha j_1 vagy j_2 egyike zérus. Ebben az esetben megtaláltuk az összes J^2 és J_z közös sajátfüggvényt, melyre (15) teljesül. Minden más esetben további sajátfüggvényeket kell keresnünk, melyek $j<j_{\max}=j_1+j_2$ kvantumszámmal rendelkeznek.

A $|\,j_1+j_2-1,j_1+j_2-1\rangle$ állapot

$$|\,j_1+j_2-1,j_1+j_2-1\rangle=c_1|\,j_1,j_1-1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2+c_2|\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2-1\rangle_2\tag{29}$$

előállítását úgy kaphatjuk meg, hogy kihasználjuk ezen állapot ortogonáltságát a $|\,j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle$ állapotra, melyből

$$c_1\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}+c_2\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}=0\tag{30}$$

következik. Mivel a sajátállapotok normáltak, ehhez még hozzá kell vennünk a

$$c_1^2+c_2^2=1\tag{31}$$

feltételt is, amiből (± 1 szorzófaktor erejéig)

$$c_1 = \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} \ , \ c_2 = -\sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} \tag{32}$$

adódik. Innen a $|\, j_1 + j_2 - 1, m\rangle \quad (m = -j_1 - j_2 + 1, \ldots, j_1 + j_2 - 2)$ állapotok J_- alkalmazásával nyerhetők, majd újabb ortogonalizálással léphetünk a $j = j_1 + j_2 - 2$ altérbe stb.

Kérdés, hogy meddig folytatható ez az eljárás, avagy mi azon $j_{\min}$ minimális érték, melyhez tartozó altér sajátfüggvényei még kikeverhetők a $|\, j_1, m_1\rangle_1 |\, j_2, m_2\rangle_2$ állapotokból? Mint említettük, a szorzatfüggvények egy $(2j_1 + 1)\,(2j_2 + 1)$ dimenziójú alteret feszítenek ki, melynek meg kell egyeznie a kikevert sajátfüggvények által kifeszített sajátalterek dimenzióinak összegével:

$$(2j_1 + 1)\,(2j_2 + 1) = \sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j + 1) \ . \tag{33}$$

Két eset lehetséges: (1) $j \in N_0$, azaz $2j + 1$ páratlan szám. Ismeretes, hogy

$$\sum_{j=0}^{n} (2j + 1) = (n + 1)^2 \tag{34}$$

$$\Downarrow$$

$$\sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j + 1) = (j_{\max} + 1)^2 - j_{\min}^2 = (j_1 + j_2 + 1)^2 - j_{\min}^2 \tag{35}$$

(2) $j \in N_0 + \frac{1}{2}$, azaz $2j + 1$ páros szám. Ekkor:

$$\sum_{j=\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} (2j + 1) = \sum_{j=\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} 2j + n + 1 = \sum_{j=0}^{n} (2j + 1) + n = (n + 1)^2 + n + 1 = (n + 1)\,(n + 2) \tag{36}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{aligned} \sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j + 1) &= \left(j_{\max} + \frac{1}{2}\right) \left(j_{\max} + \frac{3}{2}\right)^2 - \left(j_{\min} - \frac{1}{2}\right) \left(j_{\min} + \frac{1}{2}\right) \\ &= j_{\max}^2 + 2j_{\max} + 1 - j_{\min}^2 = (j_1 + j_2 + 1)^2 - j_{\min}^2 \end{aligned} \tag{37}$$

Mindkét esetben tehát azt kapjuk, hogy

$$j_{\min}^2 = (j_1 + j_2 + 1)^2 - (2j_1 + 1)\,(2j_2 + 1) = (j_1 + j_2)^2 - 4j_1 j_2 = (j_1 - j_2)^2 \tag{38}$$

azaz:

$$j_{\min} = |j_1 - j_2| \ . \tag{39}$$

Végeredményben tehát a lehetséges j kvantumszámok:

$$\boxed{j = |j_1 - j_2|\,, |j_1 - j_2| + 1, \ldots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 \ .} \tag{40}$$

Megjegyezzük még a Clebsch-Gordan együtthatók két tulajdonságát:

Ortonormáltság

$$\langle j'm'|jm\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'} \tag{41}$$

$$\langle jm|j'm'\rangle = \sum_{m_1m_2}\sum_{m_1'm_2'} C\left(j_1m_1;j_2m_2|jm\right) C\left(j_1m_1';j_2m_2'|j'm'\right) \tag{42}$$

$$\underbrace{\langle j_1m_1|j_1m_1'\rangle_1}_{\delta_{m_1m_1'}} \underbrace{\langle j_1m_1|j_1m_1'\rangle_2}_{\delta_{m_2m_2'}}$$

$$\Downarrow$$

$$\underline{\sum_{m_1m_2} C\left(j_1m_1;j_2m_2|jm\right) C\left(j_1m_1;j_2m_2|j'm'\right) = \delta_{jj'}\delta_{mm'}\ .} \tag{43}$$

Teljesség

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{m=-j}^{j} |jm\rangle\langle jm| = P_{j_1j_2}\ , \tag{44}$$

ahol $P_{j_1j_2}$ a $|\,j_1,m_1\rangle_1|\,j_2,m_2\rangle_2$ (j_1, j_2 rögzített) szorzatfüggvények által kifeszített altér projektora:

$$P_{j_1j_2} = \sum_{m_1m_2} |j_1m_1\rangle_1\langle j_1m_1| \otimes |j_2m_2\rangle_2\langle j_2m_2| \tag{45}$$

ahol $\otimes$ most a két különböző Hilbert tér projektorainak tenzorszorzatát jelöli. Ugyanakkor,

$$\begin{aligned}
&\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{m=-j}^{j} |jm\rangle\langle jm| = \\
&= \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{m=-j}^{j}\sum_{m_1m_2}\sum_{m_1'm_2'} C\left(j_1m_1;j_2m_2|jm\right) C\left(j_1m_1';j_2m_2'|jm\right) \\
&\qquad\qquad |j_1m_1\rangle_1\langle j_1m_1'| \otimes |j_2m_2\rangle_2\langle j_2m_2'| \\
&= \sum_{m_1m_2}\sum_{m_1'm_2'}\left(\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{m=-j}^{j} C\left(j_1m_1;j_2m_2|jm\right) C\left(j_1m_1';j_2m_2'|jm\right)\right) \\
&\qquad\qquad |j_1m_1\rangle_1\langle j_1m_1'| \otimes |j_2m_2\rangle_2\langle j_2m_2'|\ ,
\end{aligned} \tag{46}$$

amiből

$$\underline{\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{m=-j}^{j} C\left(j_1m_1;j_2m_2|jm\right) C\left(j_1m_1';j_2m_2'|jm\right) = \delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'}} \tag{47}$$

következik.

2. Azonos részecskékből álló rendszerek

Azonos részecskék rendszerének hullámfüggvénye

Egyrészecske hullámfüggvény spin-koordináta reprezentációban

$$\psi_1 \in \mathcal{L}^2\left(\mathbb{R}^3\right) \otimes \mathbb{C}^{2s+1} \Longrightarrow \psi_{m_1^s}\left(\overrightarrow{r}_1\right) \chi_{s,m_1^s} \equiv \psi_1\left(\overrightarrow{r}_1, m_1^s\right) \equiv \psi_1(1) \tag{48}$$

N azonos részecske hullámfüggvénye:

$$\psi_N \in \mathcal{H}_N = \underbrace{\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \ldots \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1}_{N-\text{szeres tenzorszorzat tér}} \Longrightarrow \psi_N(1,2,\ldots,N) \tag{49}$$

Két részecske felcserélése:

$$P(i,j)\,\psi_N(\ldots,i,\ldots,j,\ldots) = \psi_N(\ldots,j,\ldots,i,\ldots) \tag{50}$$

$$P(i,j)^2 = I \tag{51}$$

$$P(i,j)\,\psi = k\psi \Longrightarrow k = \pm 1 \tag{52}$$

Azonosság elve

A megtalálási valószínűség invariáns két azonos részecske felcserélésére:

$$\langle \psi_N | \psi_N \rangle = \langle P(i,j)\,\psi_N | P(i,j)\,\psi_N \rangle \tag{53}$$

ill. bármely mérési eredmény is az:

$$\langle \psi_N | A | \psi_N \rangle = \langle P(i,j)\,\psi_N | A | P(i,j)\,\psi_N \rangle \tag{54}$$

ahol A tetszőleges hermitikus többrészecske operátor. Legyen $A = |\phi\rangle\langle\phi|$, ahol $\phi \in \mathcal{H}_N$. Ekkor

$$\langle \psi_N | \phi \rangle \langle \phi | \psi_N \rangle = \langle P(i,j)\,\psi_N | \phi \rangle \langle \phi | P(i,j)\,\psi_N \rangle \ , \tag{55}$$

amit írhatunk így is:

$$\langle \phi | \psi_N \rangle \langle \psi_N | \phi \rangle = \langle \phi | P(i,j)\,\psi_N \rangle \langle P(i,j)\,\psi_N | \phi \rangle \ . \tag{56}$$

Annak, hogy a fenti egyenlőség teszőleges ϕ-re teljesüljön, elégséges feltétel:

$$|\psi_N\rangle \langle \psi_N| = |P(i,j)\,\psi_N\rangle \langle P(i,j)\,\psi_N| \tag{57}$$

amiből következik, hogy

$$|\psi_N\rangle = \frac{\langle P(i,j)\,\psi_N | \psi_N \rangle}{\langle \psi_N | \psi_N \rangle} P(i,j)\,|\psi_N\rangle \tag{58}$$

azaz ψ_N sajátfüggvénye a $P(i,j)$ felcserélési operátornak:

$$P(i,j)\,|\psi_N\rangle = k\,|\psi_N\rangle \tag{59}$$

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:

$$P(i,j)\,\psi_N = \begin{cases} \psi_N & \text{bozonok } (s=0,1,\ldots) \\ \\ -\psi_N & \text{fermionok } \left(s=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\ldots\right) \end{cases} \tag{60}$$

Hamilton operátor és Schrödinger egyenlet

$$i\hbar\partial_t\psi_N = H_N\,\psi_N \tag{61}$$

$$i\hbar\partial_t P(i,j)\,\psi_N = P(i,j)\,H_N\psi_N = P(i,j)\,H_N P(i,j)\,P(i,j)\,\psi_N \tag{62}$$

Ugyanakkor a $\psi'_N = P(i,j)\,\psi_N = \pm\psi_N$ hullámfüggvény is megoldása a Schrödinger egyenletnek:

$$i\hbar\partial_t\psi'_N = H_N\,\psi'_N \Longrightarrow i\hbar\partial_t P(i,j)\,\psi_N = H_N P(i,j)\,\psi_N \tag{63}$$

$$\Downarrow$$

$$\left[H_N - P(i,j)\,H_N P(i,j)\right]\psi_N = 0 \tag{64}$$

$$\Downarrow$$

$$H_N = P(i,j)\,H_N P(i,j) \iff \left[P(i,j)\,,H_N\right] = 0 \tag{65}$$

Mit jelent a $P(i,j)\,H_N P(i,j)$ operátor?

$$P(i,j)\,H_N(i,j)\,P(i,j)\,\psi_N(i,j) = P(i,j)\left(H_N(i,j)\,\psi_N(j,i)\right) = H_N(j,i)\,\psi_N(i,j) \tag{66}$$

azaz

$$P(i,j)\,H_N(i,j)\,P(i,j) = H_N(j,i) \tag{67}$$

$$\Downarrow$$

$$H_N(i,j) = H_N(j,i) \tag{68}$$

tehát *az azonos részecskék Hamilton operátora szükségszerűen invariáns két részecske felcserélésére.*
Következmény: a hullámfüggvény permutációs szimmetriája mozgásállandó:

$$\frac{d}{dt}\left\langle\psi_N\right|P(i,j)\left|\psi_N\right\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\psi_N\right|\left[P(i,j)\,,H_N\right]\left|\psi_N\right\rangle = 0 \tag{69}$$

Pauli elv: Az elektronok fermionok, azaz egy többelektronos hullámfüggvény antiszimmetrikus a részecskék felcserélésére nézve.

Antiszimmetrikus hullámfüggvény konstrukciója: $\varphi_a,\varphi_b \in \mathcal{H}_1 = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)\otimes\mathbb{C}^2$
Tenzorszorzat hullámfüggvények:

$$\varphi_a(1)\otimes\varphi_a(2)\,,\varphi_b(1)\otimes\varphi_b(2)\,,\varphi_a(1)\otimes\varphi_b(2)\,,\varphi_b(1)\otimes\varphi_a(2) \tag{70}$$

egyszerűsített írásmóddal:

$$\varphi_a(1)\,\varphi_a(2)\,,\varphi_b(1)\,\varphi_b(2)\,,\varphi_a(1)\,\varphi_b(2)\,,\varphi_b(1)\,\varphi_a(2) \tag{71}$$

Általános hullámfüggvény:

$$\psi(1,2) = c_{aa}\,\varphi_a(1)\,\varphi_a(2) + c_{bb}\,\varphi_b(1)\,\varphi_b(2) + c_{ab}\,\varphi_a(1)\,\varphi_b(2) + c_{ba}\,\varphi_b(1)\,\varphi_a(2) \tag{72}$$

Két részecske felcserélése:

$$\psi(2,1) = c_{aa}\,\varphi_a(2)\,\varphi_a(1) + c_{bb}\,\varphi_b(2)\,\varphi_b(1) + c_{ab}\,\varphi_a(2)\,\varphi_b(1) + c_{ba}\,\varphi_b(2)\,\varphi_a(1) \tag{73}$$
$$= c_{aa}\,\varphi_a(1)\,\varphi_a(2) + c_{bb}\,\varphi_b(1)\,\varphi_b(2) + c_{ab}\,\varphi_b(1)\,\varphi_a(2) + c_{ba}\,\varphi_a(1)\,\varphi_b(2) \tag{74}$$

ugyanakkor

$$\psi(2,1) = -\psi(1,2)$$
$$= -c_{aa}\,\varphi_a(1)\,\varphi_a(2) - c_{bb}\,\varphi_b(1)\,\varphi_b(2) - c_{ab}\,\varphi_a(1)\,\varphi_b(2) - c_{ba}\,\varphi_b(1)\,\varphi_a(2) \tag{75}$$

$$\Downarrow$$

$$c_{aa} = -c_{aa} = 0 \tag{76}$$
$$c_{bb} = -c_{bb} = 0 \tag{77}$$
$$c_{ab} = -c_{ba} \tag{78}$$

azaz

$$\psi(1,2) = \frac{\sqrt{2}}{2}\left(\varphi_a(1)\,\varphi_b(2) - \varphi_b(1)\,\varphi_a(2)\right) \tag{79}$$

ahol $\psi(1,2)$-t 1-re normáltuk. Ezt formálisan írhatjuk az alábbi determináns alakban:

$$\psi(1,2) = \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{vmatrix} \varphi_a(1) & \varphi_b(1) \\ \varphi_a(2) & \varphi_b(2) \end{vmatrix} \tag{80}$$

Általánosítás: $\varphi_{i_1}, \varphi_{i_2}, \ldots, \varphi_{i_N} \in \mathcal{H}_1$ ortonormált függvények

$$\Psi^A_{\varphi_{i_1},\varphi_{i_2},\ldots,\varphi_{i_N}}(1,\ldots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{P(1,\ldots,N)} (-1)^P\, P(1,\ldots,N)\ \varphi_{i_1}(1)\ldots\varphi_{i_N}(N) \tag{81}$$

ahol $P(1,\ldots,N)$ az $(1,\ldots,N)$ természetes számok tetszőleges permutációja, melyben a felcserélések száma P.

Slater determináns:

$$\Psi^A_{\varphi_{i_1},\varphi_{i_2},\ldots,\varphi_{i_N}}(1,\ldots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \varphi_{i_1}(1) & \varphi_{i_2}(1) & \varphi_{i_N}(1) \\ \varphi_{i_1}(2) & \varphi_{i_2}(2) & \varphi_{i_N}(2) \\ & & \\ \varphi_{i_1}(N) & \varphi_{i_2}(N) & \varphi_{i_N}(N) \end{vmatrix} \tag{82}$$

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: $\{\varphi_n \in \mathcal{H}_1,\ n \in \mathbb{N}\}$ TONR

$$\psi(1,\ldots,N) = \sum_{\substack{i_1,i_2,\ldots,i_N \in \mathbb{N} \\ (i_l \neq i_k)}} C(i_1, i_2, \ldots, i_N)\ \Psi^A_{i_1,i_2,\ldots,i_N}(1,\ldots,N) \tag{83}$$

Bozonrendszer hullámfüggvénye

Nyilvánvaló, hogy az alábbi kétrészecske hullámfüggvények szimmetrikusak a két részecske felcserélésére:

$$\varphi_a(1)\,\varphi_a(2)\,,\ \varphi_b(1)\,\varphi_b(2)\ \text{ és }\ \frac{\sqrt{2}}{2}\left(\varphi_a(1)\,\varphi_b(2)+\varphi_b(1)\,\varphi_a(2)\right) \tag{84}$$

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: $\{\varphi_n \in \mathcal{H}_1 = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^{2s+1}\}$ TONR $(s = 0, 1, 2, \ldots)$

$$\Psi^S_{i_1,i_2,\ldots,i_N}(1,\ldots,N) = \sqrt{\frac{N_1!N_2!\ldots}{N!}} \sum_{P'(1,\ldots,N)} P'(1,\ldots,N)\ \varphi_{i_1}(1)\ldots\varphi_{i_N}(N) \tag{85}$$

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:

$$\psi(1,\ldots,N) = \sum_{i_1,i_2,\ldots,i_N\in\mathbb{N}} C(i_1,i_2,\ldots,i_N)\ \Psi^S_{i_1,i_2,\ldots,i_N}(1,\ldots,N) \tag{86}$$

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:

$$\left.\begin{array}{ll} \Psi^A_{i_1,i_2,\ldots,i_N} & (i_l \neq i_k) \\ & \\ \Psi^S_{i_1,i_2,\ldots,i_N} & \end{array}\right\} = |n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots\rangle \tag{87}$$

ahol a betöltési számok:

$$\left\{\begin{array}{lll} \text{Fermionok} & n_{i_1} = n_{i_2} = \ldots = n_{i_N} = 1 & \text{egyébként} \quad n_i = 0 \\ & & \\ \text{Bozonok} & n_i = \sum_{k=1,\ldots,N} \delta_{i,i_k} \in \mathbb{N}_0 & \end{array}\right. \tag{88}$$

és természetesen teljesül, hogy a részecskék száma N :

$$\sum_{i\in\mathbb{N}} n_i = N\,. \tag{89}$$

Amennyiben az egyrészecske hullámfüggvények az egyrészecske Hamilton operátor sajátfüggvényei:

$$H_1\,\varphi_i = \varepsilon_i\,\varphi_i \tag{90}$$

akkor $|n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots\rangle$ a

$$H_N(1,\ldots,N) = H_1(1) + H_1(2)\ldots + H_1(N) \tag{91}$$

független N-részecske Hamilton-operátor sajátfüggvénye,

$$E_N = \sum_{i\in\mathbb{N}} \varepsilon_i n_i \tag{92}$$

sajátértékkel. Ez nyilvánvalóan következik abból, hogy

$$
\begin{aligned}
&(H_1(1)+H_1(2)\ldots+\ H_1(N))\left[\varphi_{i_1}(1)\otimes\ldots\otimes\varphi_{i_N}(N)\right]=\\
&=H_1(1)\,\varphi_{i_1}(1)\otimes\ldots\otimes\varphi_{i_N}(N)\\
&+\varphi_{i_1}(1)\otimes H_1(2)\,\varphi_{i_1}(1)\otimes\ldots\otimes\varphi_{i_N}(N)+\ldots\\
&+\varphi_{i_1}(1)\otimes\ldots\otimes H_1(N)\,\varphi_{i_N}(N)\\
&=(\varepsilon_{i_1}+\varepsilon_{i_2}+\ldots+\ \varepsilon_{i_N})\left[\varphi_{i_1}(1)\otimes\ldots\otimes\varphi_{i_N}(N)\right]
\end{aligned}
$$

2.1. Két kölcsönható elektron: Héliumatom

Hamilton operátor

$$H\,(1,2) = H_0\,(1,2) + V\,(1,2) \tag{93}$$

$$H_0\,(1,2) = H_1\,(1) + H_1\,(2) \tag{94}$$

$$H_1\,(i) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i - \frac{2ke^2}{r_i} \quad (i = 1,2) \tag{95}$$

$$V\,(1,2) = \frac{ke^2}{|\overrightarrow{r}_1 - \overrightarrow{r}_2|} \tag{96}$$

Egyelektron hullámfüggvények

$$H_1\,(i)\,\phi_{n\ell m m_s}\,(i) = \varepsilon_n \phi_{n\ell m m_s}\,(i) \tag{97}$$

$$\varepsilon_n = -4\frac{m\left(ke^2\right)^2}{\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{4}{n^2}\mathrm{Ryd} \tag{98}$$

2.1.1. Alapállapot

Az 1s típusú egyrészecske állapotok,

$$\phi_{1,0,0,\frac{1}{2}}\,(\overrightarrow{r}_1) = \phi_{100}\,(\overrightarrow{r}_1)\,|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle = \phi_{1s}\,(\overrightarrow{r}_1)\,|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle \tag{99}$$

$$\phi_{1,0,0,-\frac{1}{2}}\,(\overrightarrow{r}_1) = \phi_{100}\,(\overrightarrow{r}_1)\,|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle = \phi_{1s}\,(\overrightarrow{r}_1)\,|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle \tag{100}$$

direktszorzat tere négydimenziós, azonban csak egy lineárisan független kétfermion állapot létezik:

$$\psi_{(1s)^2}\,(1,2) = \phi_{1s}\,(\overrightarrow{r}_1)\,\phi_{1s}\,(\overrightarrow{r}_2)\,|00\rangle$$

ahol

$$|00\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}\left(|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle - |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle\right) \tag{101}$$

az antiszimmetrikus szinglet kétspin állapot ($S = 0$, $M_S = 0$). A perturbálatlan (kölcsönhatás mentes) héliumatomnak ez az alapállapota, melyet paraállapotnak nevezzük (Parahélium):

$$H_0\,(1,2)\;\psi_{(1s)^2}\,(1,2) = E^{(0)}_{(1s)^2}\,\psi_{(1s)^2}\,(1,2) \tag{102}$$

$$E^{(0)}_{(1s)^2} = -8\,\mathrm{Ryd} \tag{103}$$

Mi az alapállapoti energia a perturbációszámítás első rendjében?

$$\Delta E^{(1)}_{(1s)^2} = \left\langle \psi_{(1s)^2}\,(1,2) \middle| V\,(1,2) \middle| \psi_{(1s)^2}\,(1,2) \right\rangle \tag{104}$$

$$= \underbrace{\langle 00|00\rangle}_{=1} ke^2 \int \frac{\phi^*_{1s}\,(\overrightarrow{r}_1)\,\phi^*_{1s}\,(\overrightarrow{r}_2)\,\phi_{1s}\,(\overrightarrow{r}_1)\,\phi_{1s}\,(\overrightarrow{r}_2)}{|\overrightarrow{r}_1 - \overrightarrow{r}_2|}\,d^3r_1 d^3r_2 \tag{105}$$

$$= ke^2 \int \frac{\varrho_{1s}\,(\overrightarrow{r}_1)\,\varrho_{1s}\,(\overrightarrow{r}_2)}{|\overrightarrow{r}_1 - \overrightarrow{r}_2|}\,d^3r_1 d^3r_2 = C_{(1s)^2} > 0 \tag{106}$$

Ez az energiakorrekció a $\varrho_{1s}(\overrightarrow{r}) = \phi_{1s}^*(\overrightarrow{r})\,\phi_{1s}(\overrightarrow{r})$ töltéseloszlás klasszikus elektrosztatikus energiája. A számítás eredménye:

$$C_{(1s)^2} = \frac{5}{4}\frac{Zm\,(ke^2)^2}{\hbar^2} = 2.5\,\mathrm{Ryd}\ , \tag{107}$$

tehát a He atom alapállapoti energiája első rendben:

$$E_{(1s)^2}^{(1)} = E_{(1s)^2} + \Delta E_{(1s)^2}^{(1)} = -5.5\,\mathrm{Ryd} \tag{108}$$

ami nem is olyan rossz közelítés a $-5.807\,\mathrm{Ryd}$ egzakt alapűllapoti energiához képest.

2.1.2. Gerjesztett állapotok

Az 1s és 2s állapotokból négy antiszimmetrikus kételektron hullámfüggvényt képezhetünk az S^2 és S_z operátorok közös ortonormált sajátfüggvényei segítségével:

$$\begin{aligned}
|00\rangle &= \tfrac{\sqrt{2}}{2}\left(\left|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\right\rangle\left|\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\right\rangle - \left|\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\right\rangle\left|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\right\rangle\right) && \text{szinglet állapot (aszimetrikus)} \\
|10\rangle &= \tfrac{\sqrt{2}}{2}\left(\left|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\right\rangle\left|\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\right\rangle + \left|\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\right\rangle\left|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\right\rangle\right) && \\
|11\rangle &= \left|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\right\rangle\left|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\right\rangle && \text{triplet állapotok (szimetrikus)} \\
|1\,-1\rangle &= \left|\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\right\rangle\left|\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\right\rangle &&
\end{aligned} \tag{109}$$

valamint bevezetve az ugyancsak ortonormált szimmetrikus és antiszimmetrikus térfüggő komponenseket,

$$\phi_{1s-2s}^{+}(\overrightarrow{r}_1, \overrightarrow{r}_2) = \frac{\sqrt{2}}{2}\left(\phi_{1s}(\overrightarrow{r}_1)\,\phi_{2s}(\overrightarrow{r}_2) + \phi_{2s}(\overrightarrow{r}_1)\,\phi_{1s}(\overrightarrow{r}_2)\right) \tag{110}$$

$$\phi_{1s-2s}^{-}(\overrightarrow{r}_1, \overrightarrow{r}_2) = \frac{\sqrt{2}}{2}\left(\phi_{1s}(\overrightarrow{r}_1)\,\phi_{2s}(\overrightarrow{r}_2) - \phi_{2s}(\overrightarrow{r}_1)\,\phi_{1s}(\overrightarrow{r}_2)\right) \tag{111}$$

$$\Downarrow$$

$$\psi_{1s-2s}^{1}(1,2) = \phi_{1s-2s}^{+}(\overrightarrow{r}_1, \overrightarrow{r}_2)\,|00\rangle \tag{112}$$

$$\psi_{1s-2s}^{2}(1,2) = \phi_{1s-2s}^{-}(\overrightarrow{r}_1, \overrightarrow{r}_2)\,|1\,-1\rangle \tag{113}$$

$$\psi_{1s-2s}^{3}(1,2) = \phi_{1s-2s}^{-}(\overrightarrow{r}_1, \overrightarrow{r}_2)\,|10\rangle \tag{114}$$

$$\psi_{1s-2s}^{4}(1,2) = \phi_{1s-2s}^{-}(\overrightarrow{r}_1, \overrightarrow{r}_2)\,|11\rangle \tag{115}$$

Ezen állapotok a $H_0(1,2)$ perturbálatlan Hamilton operátor degenerált sajátfüggvényei,

$$H_0(1,2)\,\psi_{1s-2s}^{i}(1,2) = E_{1s-2s}\psi_{1s-2s}^{i}(1,2) \tag{116}$$

$$E_{1s-2s} = -4\left(1 + \frac{1}{4}\right)\mathrm{Ryd} = -\,5\,\mathrm{Ryd}\ . \tag{117}$$

Az elektronok közötti Coulomb kölcsönhatás operátora spin-független, ezért - figyelembevéve, hogy a spin-függvények ortonormáltak - a perturbáció operátora diagonális, így az elsőrendű energiakorrekciók

$$\Delta E_{1s-2s}^{(1),1} = \left\langle \psi_{1s-2s}^{1}(1,2)\right|V(1,2)\left|\psi_{1s-2s}^{1}(1,2)\right\rangle \tag{118}$$

$$= \int \phi_{1s-2s}^{+}(\overrightarrow{r}_1, \overrightarrow{r}_2)^*\,\frac{ke^2}{|\overrightarrow{r}_1 - \overrightarrow{r}_2|}\phi_{1s-2s}^{+}(\overrightarrow{r}_1, \overrightarrow{r}_2)\ d^3r_1 d^3r_2\ , \tag{119}$$

valamint $i = 2, 3, 4$

$$\Delta E^{(1),i}_{1s-2s} = \left\langle \psi^i_{1s-2s}(1,2) \right| V(1,2) \left| \psi^i_{1s-2s}(1,2) \right\rangle \tag{120}$$

$$= \int \phi^-_{1s-2s}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)^* \frac{ke^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \phi^-_{1s-2s}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\, d^3r_1 d^3r_2 \,. \tag{121}$$

A triplet állapotok továbbra is degeneráltak maradnak, de a szinglet és triplet állapotok energiája különbözni fog. Vizsgáljuk meg az energiakorrekciók jelentését:

$$\int \phi^\pm_{1s-2s}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)^* \frac{ke^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \phi^\pm_{1s-2s}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\, d^3r_1 d^3r_2 = \tag{122}$$

$$= \frac{1}{2} \int \phi_{1s}(\vec{r}_1)^* \phi_{2s}(\vec{r}_2)^* \frac{ke^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \phi_{1s}(\vec{r}_1) \phi_{2s}(\vec{r}_2)\, d^3r_1 d^3r_2 \tag{123}$$

$$+ \frac{1}{2} \int \phi_{2s}(\vec{r}_1)^* \phi_{1s}(\vec{r}_2)^* \frac{ke^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \phi_{2s}(\vec{r}_1) \phi_{1s}(\vec{r}_2)\, d^3r_1 d^3r_2$$

$$\pm \frac{1}{2} \int \phi_{1s}(\vec{r}_1)^* \phi_{2s}(\vec{r}_2)^* \frac{ke^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \phi_{2s}(\vec{r}_1) \phi_{1s}(\vec{r}_2)\, d^3r_1 d^3r_2$$

$$\pm \frac{1}{2} \int \phi_{2s}(\vec{r}_1)^* \phi_{1s}(\vec{r}_2)^* \frac{ke^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \phi_{1s}(\vec{r}_1) \phi_{2s}(\vec{r}_2)\, d^3r_1 d^3r_2 \,.$$

Az első két tag a korábban látott klasszikus kölcsönhatási energiát adja

$$C_{1s-2s} = ke^2 \int \frac{\varrho_{1s}(\vec{r}_1)\, \varrho_{2s}(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\, d^3r_1 d^3r_2 \,, \tag{124}$$

a második két tagnak viszont nincs klasszikus megfelelője. Mivel azonos argumentummal két különböző hullámfüggvény szerepel benne, ezt *kicserélődési integrálnak* nevezzük

$$K_{1s-2s} = ke^2 \int \frac{\phi_{1s}(\vec{r}_1)^* \phi_{2s}(\vec{r}_2)^* \phi_{2s}(\vec{r}_1) \phi_{1s}(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\, d^3r_1 d^3r_2 \in \mathbb{R} \tag{125}$$

és a szinglet-triplet energiafelhasadást pont ez a tag adja:

$$\Delta E^{(1),\text{szinglet}}_{1s-2s} = C_{1s-2s} + K_{1s-2s} \tag{126}$$

$$\Delta E^{(1),\text{triplet}}_{1s-2s} = C_{1s-2s} - K_{1s-2s} \tag{127}$$

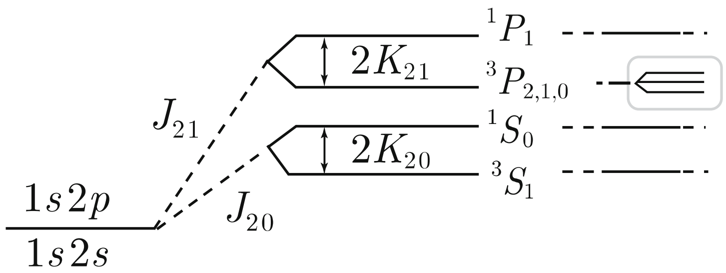
A héliumatom gerjesztett állapotainak vizsgálatakor persze azt is figyelembe kell venni, hogy az 1s és 2p állapotokból képzett Slater determinánsok is a perturbálatlan Hamilton operátor $-5\,\text{Ryd}$ energiához tartozó sajátalterében vannak. Összesen tehát egy $2 \times (2 + 6) = 16$ dimenziós altéren kellene degenerált perturbációszámítást végeznünk. Felhasználhatjuk azonban, hogy a He atom Hamilton-operátora felcserélhető a két-elektron pályaperdület operátorokkal,

$$[\vec{L}, H(1,2)] = 0$$

ahol $\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$. A $H(1,2)$ operátor sajátállapotai ezért kereshetők úgy, hogy azok az L^2 és L_z operátorok közös sajátvektorai is legyenek. Nyilvánvaló, hogy az eddig tárgyalt (1s,2s) állapotok $L = 0$ össz-pályaperdülettel rendelkeznek, míg az (1s,2p) tenzorszorzat altéren $L = 1$ perdület kvantumszámú állapotok kombinálhatók ki. Az $M_L = -1, 0, 1$ kvantumszámú állapotok mindegyike lehet spin-szinglet és triplet állapotokban, így egy 12 dimenziós altérről van szó. Könnyen látható, hogy a $V(1,2)$ perturbáló operátornak csak diagonális mátrixelemei vannak, melyek a fentiekhez hasonlóan a két-spin állapotok szerint hasadnak fel:

$$\Delta E^{(1),\text{szinglet}}_{1s-2p} = C_{1s-2p} + K_{1s-2p} \tag{128}$$
$$\Delta E^{(1),\text{triplet}}_{1s-2p} = C_{1s-2p} - K_{1s-2p} \tag{129}$$

ahol a C_{1s-2p} direkt és K_{1s-2p} kicserélődési integrálok definíciója megegyezik a korábbiakkal, csupán a ϕ_{2s} egyelektron hullámfüggvényt a ϕ_{2p} hullámfüggvénnyel kell lecserélnünk. Az 1s-(2s,2p) állapotok tenzorszorzat altere tehát ebben a közelítésben négy nívóra hasad fel, amint az alábbi ábra mutatja.



Az ábrán az integrálokra használt jelölések megfeleltetése: $J_{20} = C_{1s-2s}$, $J_{21} = C_{1s-2p}$, $K_{20} = K_{1s-2s}$, $K_{21} = K_{1s-2p}$. A He atom két-elektron állapotainak leírására a $^{2S+1}L_J$ jelölést alkalmazzuk, ahol J a $\overrightarrow{J} = \overrightarrow{J}_1 + \overrightarrow{J}_2$ ($\overrightarrow{J}_i = \overrightarrow{L}_i + \overrightarrow{S}_i$) teljes impulzusmomentum operátor négyzetének és z-komponensének közös sajátvektorait jellemző kvantumszám. Az $L = 0, 1, 2, 3, \ldots$ kvantumszámok helyett az $S, P, D, F, \ldots$ betűjelölést szokás használni. Az impulzusmomentum összeadás szabályai alapján, a spin-szinglet állapotokhoz, $S = 0$ $(2S + 0 = 1)$, a J értéke egyértelműen meghatározott: $J = L$. Az $^3S_1$ triplet állapotokra $L = 0$ miatt J értéke ugyancsak egyértelmű: $J = S = 1$. Ezen felhasadt szintek degeneráltsága $2J + 1$. A ^3P_J állapotok, azaz $L = 1$ és $S = 1$, esetén J lehetséges értékei $J = 0, 1, 2$, így ennek a nívónak az elfajultsága $1 + 3 + 5 = 9$. A későbbiekben látni fogjuk, hogy a spin-pálya kölcsönhatás miatt ez a nívó J értékei szerint három szintre hasad fel, amint azt az ábra is jelzi.

Megjegyzés: A spin-szinglet és triplet állapotok leírása effektív spin Hamilton-operátorral

$$\begin{aligned} E(S=0) &= C + K \\ E(S=1) &= C - K \end{aligned} \tag{130}$$

$$\Downarrow$$

$$E\left(S\right) = C - \left(S\left(S+1\right) - 1\right)K \tag{131}$$

$$\Downarrow$$

$$H_{\text{spin}}\left(\overrightarrow{S}_1, \overrightarrow{S}_2\right) = C + K - \frac{1}{\hbar^2}\left(\overrightarrow{S}_1 + \overrightarrow{S}_2\right)^2 K = C - \frac{1}{2}K - \frac{2K}{\hbar^2}\overrightarrow{S}_1\overrightarrow{S}_2 \tag{132}$$
$$= H_0 - J\,\overrightarrow{S}_1\overrightarrow{S}_2 \tag{133}$$

$$J = \frac{2K}{\hbar^2} \tag{134}$$

3. Szóráselmélet

Ebben a fejezetben megvizsgáljuk, hogy egy részecskeforrásból érkező részecskék hogyan szóródnak egy véges méretű szóró közegen (targeten). A szórt részecskéket a targettől távol elhelyezett detektorok érzékelik. Az egydimenziós szórás tárgyalásához hasonlóan a beeső részecskék határozott E energiával rendelkeznek (monokromatikus nyaláb), ezért a síkhullám leírást használjuk:

$$i\hbar\partial_t\psi_0\left(\vec{r},t\right) = H_0\psi_0\left(\vec{r},t\right) \tag{135}$$

$$\psi_0\left(\vec{r},t\right) = A\,e^{i\left(\vec{k}\vec{r}-\frac{E}{\hbar}t\right)} \tag{136}$$

$$E = \frac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{137}$$

ahol a szabad részecske Hamilton operátora

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2\Delta}{2m}\,. \tag{138}$$

Amennyiben egy hullámcsomaggal leírt részecske szóródását szeretnénk vizsgálni, akkor azt a síkhullámok, illetve a megfelelő szórt hullámok szuperpozíciójával tehetjük meg. A továbbiakban ezért elegendő egy határozott impulzusú (energiájú) síkhullám szórásával foglalkoznunk.

3.1. Lippmann-Schwinger egyenlet, Green-függvény, Born-sorozat

A szórási folyamat leírását az

$$i\hbar\partial_t\psi\left(\vec{r},t\right) = \left(H_0+V\left(\vec{r}\right)\right)\psi\left(\vec{r},t\right) \tag{139}$$

időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldása szolgáltatja, ahol $V\left(\vec{r}\right)$ a szóródó részecskék és a szórási objektum (target) közötti kölcsönhatást leíró potenciális energia. Mivel a potenciális energia időfüggetlen, a részecske energiája megmaradó mennyiség (*rugalmas szórás*) és áttérhetünk az időfüggetlen Schrödinger-egyenletre:

$$\psi\left(\vec{r},t\right) = \psi\left(\vec{r}\right)\,e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \tag{140}$$

$$\Downarrow$$

$$\left(H_0+V\left(\vec{r}\right)\right)\,\psi\left(\vec{r}\right) = E\,\psi\left(\vec{r}\right)\,. \tag{141}$$

Az általánosság megszorítása nélkül, célszerű a $\psi\left(\vec{r}\right)$ stacionárius megoldást a beeső hullám és egy *szórt hullám* összegeként felvenni:

$$\underline{\psi\left(\vec{r}\right) = \psi_0\left(\vec{r}\right)+\psi_{sz}\left(\vec{r}\right)} \tag{142}$$

A szórási folyamat eredményének tárgyalások a szórt hullám targettől távoli (aszimptotikus) alakjára lesz szükségünk.

A Schrödinger-egyenletbe való behelyettesítés után,

$$\left(H_0+V\left(\vec{r}\right)\right)\,\left(\psi_0\left(\vec{r}\right)+\psi_{sz}\left(\vec{r}\right)\right) = E\,\left(\psi_0\left(\vec{r}\right)+\psi_{sz}\left(\vec{r}\right)\right) \tag{143}$$

$$\left(H_0+V\left(\vec{r}\right)\right)\psi_{sz}\left(\vec{r}\right)+V\left(\vec{r}\right)\psi_0\left(\vec{r}\right) = E\,\psi_{sz}\left(\vec{r}\right) \tag{144}$$

$$\left(H_0-E\right)\psi_{sz}\left(\vec{r}\right) = -V\left(\vec{r}\right)\left(\psi_0\left(\vec{r}\right)+\psi_{sz}\left(\vec{r}\right)\right) \tag{145}$$

a szórt hullámra a

$$\underline{\left(H_0 - E\right)\psi_{sz}\left(\overrightarrow{r}\right) = -V\left(\overrightarrow{r}\right)\,\psi\left(\overrightarrow{r}\right)} \tag{146}$$

egyenletet nyerjük,

A fenti egyenletet Green-függvényes technikával tudjuk megoldani. A szabad részecske Green függvényét a

$$\left(H_0\left(\overrightarrow{r}'\right) - E\right)\,G_0\left(\overrightarrow{r}', \overrightarrow{r}, E\right) = -\delta\left(\overrightarrow{r}' - \overrightarrow{r}\right) \tag{147}$$

egyenlet definiálja és ezzel az (146) egyenlet megoldása:

$$\psi_{sz}\left(\overrightarrow{r}\right) = \int G_0\left(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{r}', E\right)V\left(\overrightarrow{r}'\right)\,\psi\left(\overrightarrow{r}'\right)\,d^3r' \tag{148}$$

illetve a teljes stacionárius megoldás

$$\underline{\psi\left(\overrightarrow{r}\right) = \psi_0\left(\overrightarrow{r}\right) + \int G_0\left(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{r}', E\right)V\left(\overrightarrow{r}'\right)\,\psi\left(\overrightarrow{r}'\right)\,d^3r'\,,} \tag{149}$$

amit *Lippmann-Schwinger egyenletnek* nevezünk. A Lippmann-Schwinger egyenlet tehát egy integrálegyenlet, ami ekvivalens a stacionárius Schrödinger-egyenlettel úgy, hogy a $G_0\left(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{r}', E\right)$ Green-függvény megfelelő választásával a differenciálegyenlet peremfeltételét is magában foglalja. Esetünkben a targettől távol, a $\psi_0\left(\overrightarrow{r}\right)$ szabad megoldás mellett, kifutó gömbhullámokat várunk negoldásként.

A Green-függvény megtalálásához vezessük be a $G_0\left(E\right)$ *rezolvens operátort,*

$$\left(H_0 - E\right)G_0\left(E\right) = -I \tag{150}$$

ahol I a Hilbert-tér egységoperátora. A fenti operátoregyenletet koordináta reprezentációban felírva:

$$\left\langle \vec{r}\right|\left(H_0 - E\right)G_0\left(E\right)\left|\vec{r}'\right\rangle = -\left\langle \vec{r}\right|\left.\vec{r}'\right\rangle = -\delta\left(\vec{r} - \vec{r}'\right)$$

$$\Downarrow$$

$$\int d^3r''\left\langle \vec{r}\right|\left(H_0 - E\right)\left|\vec{r}''\right\rangle\left\langle \vec{r}''\right|G_0\left(E\right)\left|\vec{r}'\right\rangle = \left(H_0\left(\vec{r}\right) - E\right)G_0\left(E, \vec{r}, \vec{r}'\right) = -\delta\left(\vec{r} - \vec{r}'\right)$$

ahol kihasználtuk, hogy H_0 koordinátareprezentációja diagonális,

$$\left\langle \vec{r}\right|H_0\left|\vec{r}'\right\rangle = H_0\left(\vec{r}, \vec{r}'\right) = H_0\left(\vec{r}\right)\delta\left(\vec{r} - \vec{r}'\right)\ ,$$

nyilvánvaló, hogy a rezolvens operátor koordinátareprezentációja, $\left\langle \vec{r}\right|G_0\left(E\right)\left|\vec{r}'\right\rangle = G_0\left(E, \vec{r}, \vec{r}'\right)$, a keresett Green-függvény.

Vezessük be a H_0 operátor spektrálfelbontását,

$$H_0 = \sum_n \varepsilon_n\left|n\right\rangle\left\langle n\right| \tag{151}$$

ahol ε_n és $\left|n\right\rangle$ a H_0 sajátértékei és sajátvektorai, melyek teljes ortonormált rendszert alkotnak a Hilbert-téren. Folytonos spektrum esetén az összezés helyett integrálást kell érteni. A (150) egyenletből következik:

$$\left\langle n\right|\left(E - H_0\right)G_0\left(E\right)\left|m\right\rangle = \left(E - \varepsilon_n\right)\left\langle n\right|G_0\left(E\right)\left|m\right\rangle = \delta_{nm} \tag{152}$$

azaz

$$\left\langle n\right|G_0\left(E\right)\left|m\right\rangle = \delta_{nm}\frac{1}{E - \varepsilon_n}\,. \tag{153}$$

Mivel ε_n valós értékeket vesz fel, a zérus nevező elkerülése érdekében az E energia változót kiterjesztjük a komplex síkra és a képzetes résszel zérushoz tartunk. Aszerint, hogy ezt a felső, illetve alsó komplex félsík felöl tesszük, a $G_0^+(E)$ vagy $G_0^-(E)$ rezolvens operátorokat kapjuk:

$$G_0^{\pm}(E) = \sum_n \frac{|n\rangle\langle n|}{E \pm i0 - \varepsilon_n}\,. \tag{154}$$

Nyilvanvaló, hogy illetve $G_0^+(E)$ és $G_0^-(E)$ rezolvensek egymás adjungált operátorai, és csak akkor egyeznek meg, ha az E energia nem a H_0 sajátértéke.

A Green-függvények a

$$G_0^{\pm}(E, \overrightarrow{r}', \overrightarrow{r}) = \sum_n \frac{\langle \overrightarrow{r}' | n\rangle\langle n | \overrightarrow{r}\rangle}{E \pm i0 - \varepsilon_n} = \sum_n \frac{\varphi_n(\overrightarrow{r}')\,\varphi_n(\overrightarrow{r})^*}{E \pm i0 - \varepsilon_n} \tag{155}$$

alakban írhatók, ahol $\varphi_n(\overrightarrow{r})$ a H_0 sajátfüggvényeit jelöli.

Figyelembe véve, hogy H_0 normált sajátfüggvényei a $\varphi_{\overrightarrow{p}}(\overrightarrow{r}) = \frac{1}{h^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\overrightarrow{p}\,\overrightarrow{r}}$ síkhullámok az $\varepsilon_{\overrightarrow{p}} = \frac{p^2}{2m}$ sajátértékekkel, az Green-függvény energiaváltozóját $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0$ alakban írva, a

$$G_0^{\pm}(E, \overrightarrow{r}', \overrightarrow{r}) = \frac{1}{h^3}\int \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\overrightarrow{p}(\overrightarrow{r}-\overrightarrow{r}')}}{\frac{\hbar^2k^2}{2m} + i0 - \frac{p^2}{2m}} d^3p \tag{156}$$

$$= \frac{2\pi}{h^3}\int_0^\infty \frac{p^2 dp}{\frac{\hbar^2k^2}{2m} + i0 - \frac{p^2}{2m}} \int_{-1}^{1} dx e^{\frac{i}{\hbar}p|\overrightarrow{r}-\overrightarrow{r}'|x} \tag{157}$$

$$= \frac{4m}{h^2|\overrightarrow{r} - \overrightarrow{r}'|}\int_0^\infty pdp \frac{\sin(p|\overrightarrow{r} - \overrightarrow{r}'|/\hbar)}{\hbar^2k^2 \pm i0 - p^2} \tag{158}$$

kifejezéshez jutunk. Az integrálás a reziduum-tétel segítségével elvégezhető és a

$$G_0^{\pm}(E, \overrightarrow{r}', \overrightarrow{r}) = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^{\pm ik|\overrightarrow{r}-\overrightarrow{r}'|}}{4\pi|\overrightarrow{r} - \overrightarrow{r}'|} \tag{159}$$

eredményhez vezet. Ezt függvényt fogjuk a Lippmann-Schwinger egyenlet megoldásában használni.

A Lippmann-Schwinger egyenletet formálisan a

$$\psi = \psi_0 + G_0^{\pm} V \psi \tag{160}$$

alakban írhatjuk, aminek megoldását szukcesszív approximációval állíthatjuk elő:

$$\psi^{(0)} = \psi_0 \tag{161}$$

$$\psi^{(1)} = \psi_0 + G_0^{\pm}V\psi^{(0)} = \psi_0 + G_0^{\pm}V\psi_0 \tag{162}$$

$$\psi^{(2)} = \psi_0 + G_0^{\pm}V\psi^{(1)} = \psi_0 + G_0^{\pm}V\psi_0 + \left(G_0^{\pm}V\right)^2\psi_0 \tag{163}$$

$$\psi^{(3)} = \psi_0 + G_0^{\pm}V\psi^{(2)} = \psi_0 + G_0^{\pm}V\psi_0 + \left(G_0^{\pm}V\right)^2\psi_0 + \left(G_0^{\pm}V\right)^3\psi_0 \tag{164}$$

amit *Born-sorozatnak* nevezünk. Könnyen látható, hogy a teljes megoldás

$$\psi = \psi_0 + G_0^{\pm}\sum_{n=0}^{\infty}\left(VG_0^{\pm}\right)^n V\psi_0\,. \tag{165}$$

Ha $\left\|VG_0^\pm\right\| < 1$, azaz a szóró potenciál gyenge, akkor alkalmazhatjuk a Neumann sor összegét

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left(VG_0^\pm\right)^n = \left(I - VG_0^\pm\right)^{-1} \tag{166}$$

és a Lippmann-Schwinger egyenlet megoldása:

$$\psi = \psi_0 + G_0\left(I - VG_0\right)^{-1} V\psi_0\,. \tag{167}$$

További átalakítással,

$$\begin{aligned} G_0^\pm\left(I - VG_0^\pm\right)^{-1} &= \left(\left(G_0^\pm\right)^{-1} - V\right)^{-1} = \left(E \pm i0 - H_0 - V\right)^{-1} \\ &= \left(E \pm i0 - H\right)^{-1} = G^\pm\left(E\right) \end{aligned} \tag{168}$$

a szóró közeg rezolvens operátorát kapjuk, mellyel Lippmann-Schwinger egyenlet megoldása

$$\psi = \psi_0 + G^\pm V\,\psi_0 \tag{169}$$

illetve koordinátareprezentációban,

$$\psi\left(\vec{r}\right) = \psi_0\left(\vec{r}\right) + \int G^\pm\left(E, \vec{r}, \vec{r}\,'\right) V\left(\vec{r}\,'\right)\,\psi_0\left(\vec{r}\,'\right)\,d^3r'\,. \tag{170}$$

3.2. Szórási amplitudó és hatáskeresztmetszet

Mi a továbbiakban a Born-sorozat első tagját, az ún. *Born-közelítést* használjuk:

$$\psi\left(\vec{r}\right) \simeq \psi^{(1)}\left(\vec{r}\right) = \psi_0\left(\vec{r}\right) + \int G_0^\pm\left(E, \vec{r}, \vec{r}\,'\right) V\left(\vec{r}\,'\right)\,\psi_0\left(\vec{r}\,'\right)\,d^3r'\,. \tag{171}$$

Koordinátarendszerünk origóját a target tértartományába helyezve, a szórt hullám aszimptotikus alakját úgy kapjuk meg, meghatározzuk a Green-függvényt az $r \gg r'$ határesetben, hiszen a $V\left(\vec{r}\,'\right)$ potenciál véges tartójú, míg a $\vec{r}$ vektorral jellemzett detektort ezen tartománytól távolinak gondoljuk. Megjegyezzük azonban, hogy elegendően gyors lecsengés esetén a módszer végtelen kiterjedésű potenciálra, sőt a Yukawa-potenciál határeseteként még Coulomb-potenciálra is alkalmazható (Rutherford-szórás). A Green-függvény kifejezésének nevezőjében vehetjük az $|\vec{r} - \vec{r}\,'| \simeq r$ közelítést, mert további sorfejtéssel a vezető rendű $1/r$ mellett csupán gyorsabban lecsengő ($1/r^2$, $1/r^3$,...) tagokat kapunk. A számláló exponensében viszont valóban tovább kell mennünk a fenti közelítésen, hogy a szórási hatáskeresztmetszet irányfüggését ki tudjuk számolni:

$$k\left|\vec{r} - \vec{r}\,'\right| \underset{\vec{e}_r = \frac{\vec{r}}{r}}{=} kr\sqrt{\left(\vec{e}_r - \frac{\vec{r}\,'}{r}\right)^2} = kr\sqrt{1 - \frac{2\vec{r}\,\vec{r}\,'}{r^2} + \frac{r'^2}{r^2}} \underset{r \gg r'}{\rightarrow} kr\left(1 - \frac{\vec{r}\,\vec{r}\,'}{r^2}\right) \tag{172}$$

amiből a Green-függvény aszimptotikus alakja,

$$G_0^\pm\left(E, \vec{r}\,', \vec{r}\right) \rightarrow -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^{\pm ikr}}{4\pi r}e^{\mp i\vec{k}\,'\vec{r}\,'} \tag{173}$$

ahol

$$\vec{k}\,' = k\vec{e}_r = k\frac{\vec{r}}{r} \tag{174}$$

a detektor irányába haladó részecskehullám hullámvektorát jelenti.

Mivel az $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ időfüggő fázisfaktor figyelembevételével, az e^{ikr}/r függvény a gömb középpontjából kifutó, míg e^{-ikr}/r egy befutó gömbhullámot ír le, a szórásprobléma megoldáshoz a $G_0^{\pm}\left(E, \overrightarrow{r}', \overrightarrow{r}\right)$ Green-függvényt használjuk:

$$\psi_{sz}\left(\overrightarrow{r}\right) \simeq -\frac{e^{ikr}}{r}\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\overrightarrow{k}'\overrightarrow{r}'}V\left(\overrightarrow{r}'\right)e^{i\overrightarrow{k}\overrightarrow{r}'}\,d^3r'\,. \tag{175}$$

Az aszimptotikus hullámfüggvény tehát a

$$\underline{\psi\left(\overrightarrow{r}\right) \simeq A\left(e^{i\overrightarrow{k}\overrightarrow{r}} + f\left(\overrightarrow{q}\right)\frac{e^{ikr}}{r}\right)} \tag{176}$$

alakban írható, ahol bevezettük az ún. *szórásamplitúdót,*

$$\underline{f\left(\overrightarrow{q}\right) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V\left(\overrightarrow{r}'\right)e^{-i\overrightarrow{q}\overrightarrow{r}'}\,d^3r'} \tag{177}$$

ahol

$$\overrightarrow{q} = \overrightarrow{k}' - \overrightarrow{k} = k\frac{\overrightarrow{r}}{r} - \overrightarrow{k} = k\left(\overrightarrow{e}_r - \overrightarrow{e}_k\right) \tag{178}$$

Természetes választásnak tűnik, hogy a koordinátarendszer z tengelyét a befutó hullám irányában vegyük fel, $\overrightarrow{e}_k = \overrightarrow{e}_z$. A $\overrightarrow{q}$ vektor általánosan függ az $\overrightarrow{e}_r$ irányvektor azimutális és polárszögétől, azaz

$$f\left(\overrightarrow{q}\right) = f\left(\vartheta, \varphi\right)\ .$$

A $\overrightarrow{q}$ vektor hossza viszont csak a ϑ függvénye:

$$\overrightarrow{q}^2 = 2k^2\left(1 - \overrightarrow{e}_k\overrightarrow{e}_r\right) = 2k^2\left(1-\cos\vartheta\right) = 4k^2\sin^2\frac{\vartheta}{2} \to q = 2k\sin\frac{\vartheta}{2}\,. \tag{179}$$

Ez azt jelenti, hogy hengerszimmetrikus potenciál esetén a szórásamplitúdó csak q-tól, azaz csak a ϑ szögtől függ:

$$f\left(q\right) = -\frac{m}{\hbar^2}\int_0^\infty r'^2dr'\int_0^\pi \sin\vartheta' d\vartheta' V\left(r', \vartheta'\right)e^{-iqr'\cos\vartheta'}\,. \tag{180}$$

Gömbszimmetrikus potenciál esetén:

$$\begin{aligned} f\left(q\right) &= -\frac{m}{\hbar^2}\int_0^\infty r'^2dr'V\left(r'\right)\int_{-1}^1 dx\, e^{-iqr'x} \\ &= -\frac{2m}{q\hbar^2}\int_0^\infty r'dr'V\left(r'\right)\sin qr'\,. \end{aligned} \tag{181}$$

Már korábban is említettük, hogy a Born-közelítés feltétele, hogy a szórópotenciál gyenge legyen, de a fenti kifejezés nevezőjében szereplő q, ami arányos az energia négyzetgyökével, is arra utal, hogy a szórásamplitúdó *nagy energiák esetén* lesz elegendően kicsi, hogy a *Born-közelítés alkalmazható* legyen.

A szórási kísérletekben elsődlegesen a hatáskeresztmetszetet mérjük, ezért nézzük meg, hogy lehet ezt kiszámolni. A beeső nyaláb áramsűrűsége

$$\overrightarrow{j}_0 = |A|^2\,\frac{\hbar\overrightarrow{k}}{m} \tag{182}$$

mely nyilvánvalóan arányos a részecskeáram intenzitásával (az időegység alatt bejövő részecskék számával). A szórt hullám radiális áramsűrűsége:

$$\begin{aligned}\vec{j}_{sz}(\vec{r})\vec{e}_r &= \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*_{sz}(\vec{r})\partial_r\psi_{sz}(\vec{r}) - \psi_{sz}(\vec{r})\partial_r\psi^*_{sz}(\vec{r})\right) \\ &= \mathrm{Re}\left(\frac{\hbar}{mi}\psi^*_{sz}(\vec{r})\partial_r\psi_{sz}(\vec{r})\right)\end{aligned} \tag{183}$$

mely a

$$\partial_r\psi_{sz}(\vec{r}) = f(\vartheta,\varphi)\,\partial_r\frac{e^{ikr}}{r} = -f(\vartheta,\varphi)\,\frac{e^{ikr}}{r^2} + ikf(\vartheta,\varphi)\,\frac{e^{ikr}}{r} \underset{r\to\infty}{\to} ikf(\vartheta,\varphi)\,\frac{e^{ikr}}{r} \tag{184}$$

közelítéssel a

$$\vec{j}_{sz}(\vec{r})\vec{e}_r \simeq |A|^2\,\frac{\hbar k}{m}\frac{|f(\vartheta,\varphi)|^2}{r^2} = j_0\frac{|f(\vartheta,\varphi)|^2}{r^2} \tag{185}$$

alakban adható meg. A detektor $\vec{e}_r$ irányra merőleges $dA = r^2 d\Omega$ felületén időegység alatt áthaladó szórt részecskék száma

$$dN(\vartheta,\varphi) = (\vec{j}_{sz}\vec{e}_r)\,r^2 d\Omega = j_0\,|f(\vartheta,\varphi)|^2\,d\Omega \tag{186}$$

ami arányos a *differenciális hatáskeresztmetszettel*:

$$dN(\vartheta,\varphi) = \sigma(\vartheta,\varphi)\;j_0 d\Omega\,. \tag{187}$$

Innen adódik a differenciális hatáskeresztmetszet és a szórásamplitúdó egyszerű kapcsolata:

$$\underline{\sigma(\vartheta,\varphi) = |f(\vartheta,\varphi)|^2} \tag{188}$$

illetve a tárgyalt Born-közelítésben:

$$\underline{\sigma(\vartheta,\varphi) = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int V(\vec{r})\;e^{-i\vec{q}\,\vec{r}}\;d^3r\right|^2} \tag{189}$$

A teljes szórási hatáskeresztmetszet

$$\sigma = \int d\Omega\,\sigma(\Omega) \tag{190}$$

melynek számítása a Born-közelítésben félrevezető lehet, mert nem teljesíti az ún. optikai tételt (l. később).

Összetett target hatáskereszmetszete: Ha a szóró közeg $\vec{R}_i$ (közép)pontokba helyezett, azonos atomokból (molekulákból) áll és az egyes atomok kompakt tartójú potenciálja $V_0(\vec{r})$, akkor a rendszer potenciális energiája.

$$V(\vec{r}) = \sum_i V_0\left(\vec{r} - \vec{R}_i\right)\,. \tag{191}$$

Ekkor Born-közekítésben a szórásamplitudó arányos a következő kifejezéssel:

$$\int V(\vec{r}\,')\;e^{i\vec{q}\,\vec{r}}\;d^3r' = \left(\int V_0(\vec{r})\;e^{-i\vec{q}\,\vec{r}}\;d^3r\right)\sum_i e^{i\vec{q}\,\vec{R}_i} \tag{192}$$

és a differenciális hatáskeresztmetszet az alábbi alakban írható:

$$\underline{\sigma(\vec{q}) = \sigma_0(\vec{q})\;S(\vec{q})} \tag{193}$$

ahol az egy atomi potenciálhoz rendelt hatáskeresztmetszetet *alakfaktor*nak nevezzük:

$$\sigma_0\left(\overrightarrow{q}\right) = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int V_0\left(\overrightarrow{r}\right)\, e^{-i\overrightarrow{q}\,\overrightarrow{r}}\, d^3r\right|^2 \tag{194}$$

míg az atomi pozíciókra vonatkozó információ a statikus *szerkezeti tényező*ben jelenik meg:

$$S\left(\overrightarrow{q}\right) = \sum_{i,j} e^{i\overrightarrow{q}\left(\overrightarrow{R}_j - \overrightarrow{R}_i\right)} . \tag{195}$$

3.3. Parciális hullámok módszere

A hidrogén atom tárgyalásakor láttuk, hogy gömbszimmetrikus potenciál esetén a Schrödinger-egyenlet megoldásai

$$\psi_{\ell m}\left(E, \overrightarrow{r}\right) = \frac{R_\ell\left(E, r\right)}{r} Y_\ell^m\left(\vartheta, \varphi\right) \tag{196}$$

alakúak, ahol $R_\ell\left(E, r\right)$ kielégíti a radiális Schrödinger-egyenletet:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell\left(\ell+1\right)}{r^2} + V\left(r\right) - E\right) R_\ell\left(E, r\right) = 0 . \tag{197}$$

Az általános megoldás ezek lineáris kombinációja,

$$\psi\left(E, \overrightarrow{r}\right) = \sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell} c_{\ell m}\frac{R_\ell\left(E, r\right)}{r} Y_\ell^m\left(\vartheta, \varphi\right) \tag{198}$$

ahol a $c_{\ell m}$ együtthatókat a határfeltételek határozzák meg.

Vizsgáljuk először a szabad elektron megoldást! Bevezetve a $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ hullámszámot, a

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell\left(\ell+1\right)}{r^2} + k^2\right) R_\ell\left(r\right) = 0 \tag{199}$$

egyenletet kapjuk. Ennek az origóban véges (reguláris) megoldásai:

$$R_\ell^{\mathrm{reg}}\left(r\right) = r\, j_\ell\left(kr\right) , \tag{200}$$

ahol $j_\ell\left(x\right)$ az ún. elsőrendű gömbi Bessel függvények, melyek az alábbi határfeltételeknek tesznek eleget:

$$j_\ell\left(x\right) \underset{x\to 0}{\to} \frac{x^\ell}{(2\ell+1)!!} \text{ és } j_\ell\left(x\right) \underset{x\to\infty}{\to} \frac{1}{x}\sin\left(x - \ell\frac{\pi}{2}\right) . \tag{201}$$

Az origóban divergáló (irreguláris) megoldások

$$R_\ell^{\mathrm{irreg}}\left(r\right) = r\, n_\ell\left(kr\right) , \tag{202}$$

ahol $n_\ell\left(x\right)$ a másodrendű gömbi Bessel függvények (vagy Neumann függvények) az alábbi határértékekkel:

$$n_\ell\left(x\right) \underset{x\to 0}{\to} -\frac{(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}} \text{ és } n_\ell\left(x\right) \underset{x\to\infty}{\to} -\frac{1}{x}\cos\left(x - \ell\frac{\pi}{2}\right) . \tag{203}$$

A szóró közegtől távol ($V = 0$) az általános megoldás tehát felvehető a

$$\psi(\overrightarrow{r}) = \sum_{\ell m} \left[A_{\ell m} j_\ell(kr) - B_{\ell m} n_\ell(kr)\right] Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) \tag{204}$$

$$\simeq \sum_{\ell} \frac{1}{kr} \left[A_{\ell m} \sin\left(kr - \ell\frac{\pi}{2}\right) + B_{\ell m} \cos\left(kr - \ell\frac{\pi}{2}\right)\right] Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) \tag{205}$$

alakban. A radiális hullámfüggvényeket (egy komplex szorzófaktor erejéig) valós függvénynek választva,

$$\psi(\overrightarrow{r}) = \sum_{\ell} \frac{C_{\ell m}}{kr} \left[\cos\delta_{\ell m} \sin\left(kr - \ell\frac{\pi}{2}\right) + \sin\delta_{\ell m} \cos\left(kr - \ell\frac{\pi}{2}\right)\right] Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) \tag{206}$$

$$= \sum_{\ell} \frac{C_{\ell m}}{kr} \sin\left(kr - \ell\frac{\pi}{2} + \delta_{\ell m}\right) Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) \tag{207}$$

ahol $C_{\ell m} \in \mathbb{C}$ ($|C_{\ell m}|^2 = |A_{\ell m}|^2 + |B_{\ell m}|^2$) és $\delta_{\ell m} \in \mathbb{R}$. A $\delta_{\ell m}$ mennyiséget *parciális fázistolás*nak hívjuk.

A z irányban beeső síkhullámot is kifejthetjük a gömbi Bessel függvények szerint (Bauer azonosság):

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\vartheta} = \sum_{\ell} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} i^\ell j_\ell(kr) Y_\ell^0(\vartheta) , \tag{208}$$

így a szórásmegoldás aszimptotikus alakja:

$$\psi(\overrightarrow{r}) = Ae^{ikz} + \psi_{sz}(\overrightarrow{r})$$

$$= \sum_{\ell} \frac{A}{kr} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} i^\ell \sin\left(kr - \ell\frac{\pi}{2}\right) Y_\ell^0(\vartheta) + Af(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \tag{209}$$

$$= \sum_{\ell} \frac{A}{kr} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} i^\ell \frac{e^{i\left(kr - \ell\frac{\pi}{2}\right)} - e^{-i\left(kr - \ell\frac{\pi}{2}\right)}}{2i} Y_\ell^0(\vartheta) + Af(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \tag{210}$$

$$= \frac{e^{ikr}}{r} \left(Af(\vartheta, \varphi) + \sum_{\ell} \frac{A}{2ki} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} Y_\ell^0(\vartheta)\right)$$

$$- \frac{e^{-ikr}}{r} \left(\sum_{\ell} \frac{A(-1)^\ell}{2ki} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} Y_\ell^0(\vartheta)\right) , \tag{211}$$

mely tehát egy kifutó és befutó gömbhullám szuperpozíciója.

Ezt kell összevetnünk a (207) függvényalakkal:

$$\psi(\overrightarrow{r}) = \sum_{\ell m} \frac{C_{\ell m}}{kr} \frac{e^{i\left(kr - \ell\frac{\pi}{2} + \delta_{\ell m}\right)} - e^{-i\left(kr - \ell\frac{\pi}{2} + \delta_{\ell m}\right)}}{2i} Y_\ell^m(\vartheta) \tag{212}$$

$$= \frac{e^{ikr}}{r} \left(\sum_{\ell m} \frac{C_{\ell m} e^{i\delta_{\ell m}} i^{-\ell}}{2ki} Y_\ell^0(\vartheta)\right) - \frac{e^{-ikr}}{r} \left(\sum_{\ell m} \frac{C_{\ell m} e^{-i\delta_{\ell m}} i^\ell}{2ki} Y_\ell^m(\vartheta)\right) \tag{213}$$

A befutó gömbhullám együtthatóinak azonosságából:

$$\sum_{\ell} \frac{A(-1)^\ell}{2ki} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} Y_\ell^0(\vartheta) = \sum_{\ell m} \frac{C_{\ell m} e^{-i\delta_{\ell m}} i^\ell}{2ki} Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) \tag{214}$$

$$\Downarrow$$
$$\frac{A\left(-1\right)^{\ell}}{2ki}\sqrt{4\pi\left(2\ell+1\right)}\delta_{m,0}=\frac{C_{\ell m}e^{-i\delta_{\ell m}}i^{\ell}}{2ki} \tag{215}$$
$$\Downarrow$$
$$C_{\ell m}=\delta_{m,0}\,Ae^{i\delta_{\ell 0}}i^{\ell}\sqrt{4\pi\left(2\ell+1\right)}\ , \tag{216}$$

azaz a $C_{\ell m}$ együtthatók és a $\delta_{\ell m}$ parciális fázistolások csak $m=0$ esetén különböznek zérustól, melyekre bevezetjük a C_ℓ és δ_ℓ jelöléseket. Ebből következik, hogy a vizsgált szórásmegoldás hengerszimmetrikus, így a szórásamplitudó is csak a ϑ szög függvénye. A kifutó gömbhullám együtthatónak azonosságából,

$$\begin{aligned} Af\left(\vartheta\right)+\sum_{\ell}\frac{A}{2ki}\sqrt{4\pi\left(2\ell+1\right)}Y_{\ell}^{0}\left(\vartheta\right) &= \sum_{\ell}\frac{C_{\ell}e^{i\delta_{\ell}}i^{-\ell}}{2ki}Y_{\ell}^{0}\left(\vartheta\right) \\ &= \sum_{\ell}\frac{Ae^{2i\delta_{\ell}}}{2ki}\sqrt{4\pi\left(2\ell+1\right)}Y_{\ell}^{0}\left(\vartheta\right) \end{aligned} \tag{217}$$

kapjuk a szórási amplitúdót:

$$\begin{aligned} \underline{f\left(\vartheta\right)} &= \sum_{\ell}\frac{e^{2i\delta_{\ell}}-1}{2ki}\sqrt{4\pi\left(2\ell+1\right)}Y_{\ell}^{0}\left(\vartheta\right) \\ &= \underline{\sum_{\ell}\frac{\sqrt{4\pi\left(2\ell+1\right)}}{k}e^{i\delta_{\ell}}\sin\delta_{\ell}\,Y_{\ell}^{0}\left(\vartheta\right)} \end{aligned} \tag{218}$$

A teljes hatáskeresztmetszet:

$$\begin{aligned} \underline{\sigma_{\text{tot}}} &= \int d\Omega\,\sigma\left(\vartheta\right)=\int d\Omega\,\left|f\left(\vartheta\right)\right|^{2} \\ &= \frac{4\pi}{k^{2}}\sum_{\ell,\ell'}\sqrt{\left(2\ell+1\right)\left(2\ell'+1\right)}\,e^{i\delta_{\ell}}e^{-i\delta_{\ell'}}\sin\delta_{\ell}\,\sin\delta_{\ell'}\underbrace{\int d\Omega Y_{\ell}^{0}\left(\vartheta\right)^{*}Y_{\ell'}^{0}\left(\vartheta\right)}_{\delta_{\ell\ell'}} \\ &= \underline{\frac{4\pi}{k^{2}}\sum_{\ell}\left(2\ell+1\right)\,\sin^{2}\delta_{\ell}}\ . \end{aligned} \tag{219}$$

ahol felhasználtuk az $Y_{\ell}^{0}\left(\vartheta\right)$ gömbharmonikusok ortonormáltságát.

A teljes hatáskeresztmetszetre kapott fenti összefüggés elvben egzakt, a végtelen számú parciális járulék miatt az összegzés elvégzése azonban nyilvánvalóan nehéz. Az ℓ-ik parciális hullámállapotban lévő részecske perdülete $L=\hbar\sqrt{\ell\left(\ell+1\right)}$. Klasszikus analógiával élve, a szabad részecske origóra vonatkoztatott $L=pa$ perdülete és az E energia között fennáll az $E=L^2/2ma^2$, ahol a az ún. impakt paraméter. Ebből az $E=\hbar^2\ell\left(\ell+1\right)/2ma^2$ összefüggést kapjuk. Ha a szórási potenciál R sugáron kívül zérus (vagy erősen lecseng), akkor $a>R$ esetén nem várunk szórást, azaz azok a parciális hullámok, melyekre $\ell\left(\ell+1\right)>2mER^2/\hbar^2$, nem járulnak hozzá jelentősen a szóráshoz. Ebből következik, hogy kis energia esetén, csak kevés szórási csatornát (ℓ) kell figyelembe vennünk a (219) egyenletben. *A parciális hullámok módszere tehát általában véges tartójú potenciál és kis energia esetén alkalmazható.*

Megjegyezzük még, hogy $\ell=0$ esetén mindig van szórás (zérustól különböző fázistolás). C. Ramsauer és J. S. Townsend 1921-ben egymástól függetlenül vizsgálták nagyon lassú elektronok szórását nemesgázokon (He, Ar) . Azt tapasztalták, hogy bizonyos energián az elektronok lényegében akadálytalanul hatolnak át a közegen. Ez annak tudható be, hogy ezen energián az s-szórás fázistolása közel zérussal egyezik meg, így a teljes szórási hatáskeresztmetszet markáns minimumot mutat. Ha viszont a fázistolás $\delta_\ell(E) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi$ értéket vesz fel, akkor az adott parciális csatornában a szórási hatáskeresztmetszet maximummal rendelkezik. Ezt *rezonanciaszórás*nak nevezzük.

3.4. Optikai tétel

A (218) és (219) képletek alapján közvetlen összefüggés található a szórásamplitúdó és a teljes hatáskeresztmetszet között. Ugyanis,

$$\mathrm{Im}\ f(\vartheta) = \sum_\ell \frac{\sqrt{4\pi(2\ell+1)}}{k} \sin^2\delta_\ell\, Y_\ell^0(\vartheta) \tag{220}$$

és felhasználva, hogy $Y_\ell^0(\vartheta = 0) = P_\ell(1) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}$ ($P_\ell(x)$ a Legendre polinomok, l. https://en.wikipedia.org/wiki/Legendre_polynomials) kapjuk, hogy

$$\mathrm{Im}\ f(\vartheta = 0) = \frac{1}{k}\sum_\ell (2\ell+1)\sin^2\delta_\ell\,, \tag{221}$$

amiből

$$\underline{\sigma_{\mathrm{tot}} = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}\ f(\vartheta = 0)} \tag{222}$$

következik. Az előreszórás amplitúdójának imaginárius része tehát arányos a teljes hatáskeresztmetszettel. Ez az ún. *optikai tétel,* mely a szórási folyamatokra a részecskék (megtalálási valószínűség) megmaradását fejezi ki, azaz a kontinuitási egyenletből következik. A bejövő síkhullám valószínűségi áramfluxusa egy zárt térfogatra zérus, míg a szórt hullám (kifutó gömbhullám) valószínűségi áramfluxusa arányos a teljes hatáskereszmetszettel. Stacionárius esetben a teljes valószínűségi áramfluxusnak el kell tűnnie egy zárt felületen. A bejövő síkhullám és a szórt hullám szuperpozíciójából adódó valószínűségi áramfluxusnak tehát ki kell egyenlítenie a szórt hullám áramfluxusát. Ennek következménye az optikai tétel, mely rugalmas és rugalmatlan szórásra egyaránt érvényes.

Bizonyítás rugalmas szórásra:

$$\psi(\overrightarrow{r}) = \psi_0(\overrightarrow{r}) + \psi_{sz}(\overrightarrow{r}) \tag{223}$$

A valószínűségi áramsűrűség

$$\begin{aligned}\overrightarrow{j} &= \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\overrightarrow{\nabla}\psi - \psi\overrightarrow{\nabla}\psi^*\right)\\ &= \frac{\hbar}{2mi}\left[(\psi_0^* + \psi_{sz}^*)\overrightarrow{\nabla}(\psi_0 + \psi_{sz}) - (\psi_0 + \psi_{sz})\overrightarrow{\nabla}(\psi_0^* + \psi_{sz}^*)\right]\end{aligned} \tag{224}$$

$$\overrightarrow{j} = \overrightarrow{j}_0 + \overrightarrow{j}_{sz} + \overrightarrow{j}_{\mathrm{int}} \tag{225}$$

A beeső hullám áramsűrűsége

$$\overrightarrow{j}_0 = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_0^*\overrightarrow{\nabla}\psi_0 - \psi_0\overrightarrow{\nabla}\psi_0^*\right) \tag{226}$$

A szórt hullám áramsűrűsége

$$\overrightarrow{j}_{sz} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_{sz}^*\overrightarrow{\nabla}\psi_{sz} - \psi_{sz}\overrightarrow{\nabla}\psi_{sz}^*\right) \tag{227}$$

A szuperponált hullámok áramsűrűsége (interferencia tag)

$$\overrightarrow{j}_{\text{int}} = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi_0^*\overrightarrow{\nabla}\psi_{sz} + \psi_{sz}^*\overrightarrow{\nabla}\psi_0 - \psi_0\overrightarrow{\nabla}\psi_{sz}^* - \psi_{sz}\overrightarrow{\nabla}\psi_0^*\right] \tag{228}$$

ennek radiális komponense

$$\overrightarrow{j}_{\text{int}}\overrightarrow{e}_r = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi_0^*\partial_r\psi_{sz} + \psi_{sz}^*\partial_r\psi_0 - \psi_0\partial_r\psi_{sz}^* - \psi_{sz}\partial_r\psi_0^*\right] \tag{229}$$

illetve az aszimptotikus tartományban

$$\psi_0\left(\overrightarrow{r}\right) = e^{ikr\cos\vartheta} \to \partial_r\psi_0\left(\overrightarrow{r}\right) = ik\cos\vartheta e^{ikr\cos\vartheta} \tag{230}$$

$$\psi_{sz}\left(\overrightarrow{r}\right) = f\left(\vartheta,\varphi\right)\frac{e^{ikr}}{r} \to \partial_r\psi_{sz}\left(\overrightarrow{r}\right) = ikf\left(\vartheta,\varphi\right)\frac{e^{ikr}}{r} + o\left(\frac{1}{r^2}\right) \tag{231}$$

$$\begin{aligned}\overrightarrow{j}_{\text{int}}\overrightarrow{e}_r \simeq\ & \frac{\hbar k}{2mr}\left[e^{ikr(1-\cos\vartheta)}f\left(\vartheta,\varphi\right) + e^{-ikr(1-\cos\vartheta)}\cos\vartheta\, f^*\left(\vartheta,\varphi\right)\right. && (232)\\ & \left. + e^{-ikr(1-\cos\vartheta)}f^*\left(\vartheta,\varphi\right) + e^{ikr(1-\cos\vartheta)}\cos\vartheta\, f\left(\vartheta,\varphi\right)\right] \\ \simeq\ & \frac{\hbar k}{2mr}\left[e^{ikr(1-\cos\vartheta)}\left(1+\cos\vartheta\right)f\left(\vartheta,\varphi\right) + e^{-ikr(1-\cos\vartheta)}\left(1+\cos\vartheta\right)f^*\left(\vartheta,\varphi\right)\right] && (233)\\ =\ & \frac{\hbar k}{mr}\,\mathrm{Re}\left(e^{ikr(1-\cos\vartheta)}\left(1+\cos\vartheta\right)f\left(\vartheta,\varphi\right)\right) && (234)\end{aligned}$$

Ha $\vartheta \neq 0$, akkor $1-\cos\vartheta \neq 0$, ezért $kr \gg 1$ miatt $e^{ikr(1-\cos\vartheta)}$ ϑ függvényében igen gyorsan oszcillál. Mivel az $\left(1+\cos\vartheta\right)f\left(\vartheta,\varphi\right)$ függvény ehhez képest lassan változik, az interferencia áramsűrűség integrálja a térszög egy $\vartheta = 0$ körüli kis tartományán kívül zérusra átlagolódik, és a fluxushoz csak a $0 \le \vartheta \le \delta\vartheta$, $0 \le \varphi \le 2\pi$ kúpszögből kapunk járulékot, ahol $\delta\vartheta$ egy zérustól különböző kis érték. Az interferencia áramsűrűséget ebben a tartományban az alábbi módon közelíthetjük:

$$\lim_{\vartheta\to 0}\overrightarrow{j}_{\text{int}}\overrightarrow{e}_r \simeq \frac{2\hbar k}{mr}\,\mathrm{Re}\left(e^{ikr\vartheta^2/2}f\left(\vartheta=0\right)\right) \tag{235}$$

és a megfelelő fluxus:

$$\begin{aligned}\int d\Omega\,\overrightarrow{j}_{\text{int}}\overrightarrow{e}_r \simeq\ & \frac{2\hbar k}{mr}\,\mathrm{Re}\left(f\left(0\right)\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\delta\vartheta}d\vartheta\,\sin\vartheta e^{ikr\vartheta^2/2}\right)\\ \simeq\ & \frac{4\pi\hbar k}{mr}\,\mathrm{Re}\left(f\left(0\right)\int_0^{\delta\vartheta}d\vartheta\,\vartheta e^{ikr\vartheta^2/2}\right)\\ \underset{x=\vartheta^2/2}{=}\ & \frac{4\pi\hbar k}{mr}\,\mathrm{Re}\left(f\left(0\right)\int_0^{\delta x}dx\,e^{ikrx}\right)\\ =\ & \frac{4\pi\hbar k}{mr}\,\mathrm{Re}\left(\frac{f\left(0\right)}{ikr}\left(e^{ikr\delta x}-1\right)\right) && (236)\end{aligned}$$

ahol $\delta x = \left(\delta\vartheta\right)^2/2$. Emlékezzünk vissza, hogy a Lippmann-Schwinger egyenletben a kifutó hullám Green-függvényét alkalmaztuk, amit (a kontúrintegrálásból adódóan) precízen az alábbi határérték definiál:

$$\lim_{\alpha\to+0}G_0^+\left(\overrightarrow{r}', \overrightarrow{r}, E+i\alpha\right) = -\frac{2m}{\hbar^2}\lim_{\beta\to+0}\frac{e^{i(k+i\beta)\left|\overrightarrow{r}'-\overrightarrow{r}\right|}}{4\pi\left|\overrightarrow{r}'-\overrightarrow{r}\right|} \tag{237}$$

ahol $E + i\alpha = \frac{\hbar^2(k+i\beta)^2}{2m}$. Tetszőlegesen kicsi, pozitív β-ra:

$$e^{i(k+i\beta)r\delta x} = e^{ikr\delta x}e^{-\beta r\delta x} \stackrel{r\to\infty}{\to} 0 \tag{238}$$

így az interferencia áramsűrűség fluxusából az oszcilláló tagot elhagyhatjuk:

$$\int d\Omega \, \overrightarrow{j}_{\text{int}} \overrightarrow{e}_r \simeq \frac{4\pi\hbar k}{mr} \operatorname{Re}\left(-\frac{f(0)}{ikr}\right) \simeq -\frac{4\pi}{r^2}\frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} f(0) \tag{239}$$

A beeső síkhullám valószínűségi áramfluxusa

$$\int d\Omega \, \overrightarrow{j}_0 \overrightarrow{e}_r = \frac{\hbar \overrightarrow{k}}{m} \int d\Omega \, \overrightarrow{e}_r = 0 \tag{240}$$

A szórt hullám valószínűségi áramfluxusa

$$r^2 \int d\Omega \, \overrightarrow{j}_{sz} \overrightarrow{e}_r = \frac{\hbar k}{m}\sigma_{\text{tot}} \tag{241}$$

A stacionárius hullámfüggvény teljes valószínűségi áramfluxusa zérus:

$$r^2 \int d\Omega \, \overrightarrow{j} \overrightarrow{e}_r = \frac{\hbar k}{m}\sigma_{\text{tot}} - 4\pi\frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} f(0) = 0 \tag{242}$$

$$\Downarrow$$

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0) \tag{243}$$

4. Kvantummechanikai leírási módok (képek)

4.1. Schrödinger kép

Időfüggetlen Hamilton operátor

$$\partial_t H^S(t) = 0 \tag{244}$$

Időfüggő Schrödinger egyenlet

$$\underline{i\hbar\partial_t \psi^S(t) = H^S \psi^S(t)} \tag{245}$$

Határfeltétel a hullámfüggvényre

$$\psi^S(t_0) = \varphi \tag{246}$$

Időfejlesztő operátor

$$\psi^S(t) = U(t, t_0)\, \psi^S(t_0) \tag{247}$$

$$U(t_0, t_0) = I \tag{248}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H^S U(t, t_0) \tag{249}$$

$$U(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} H^S U(t', t_0)\, dt' \tag{250}$$

$$U^{(k+1)}(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} H^S U^{(k)}(t', t_0)\, dt' \tag{251}$$

$$U^{(0)}(t, t_0) = I \tag{252}$$

$$U^{(1)}(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} H^S dt' = I - \frac{i}{\hbar} H^S (t - t_0) \tag{253}$$

$$U^{(2)}(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} H^S (t - t_0) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \frac{\left(H^S\right)^2 (t - t_0)^2}{2} \tag{254}$$

$$U^{(3)}(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} H^S (t - t_0) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \frac{\left(H^S\right)^2 (t - t_0)^2}{2} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3 \frac{\left(H^S\right)^3 (t - t_0)^3}{3!} \tag{255}$$

$$U^{(k)}(t, t_0) = \sum_{l=0}^{k} \frac{1}{l!} \left(-\frac{i}{\hbar} H^S (t - t_0)\right)^l \tag{256}$$

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H^S (t - t_0)} \tag{257}$$

$$\left[U(t, t_0), H^S\right] = 0 \tag{258}$$

Az időfejlesztő operátor unitér:

$$i\hbar \frac{d}{dt} U^\dagger(t, t_0) = -U^\dagger(t, t_0)\, H^S \tag{259}$$

$$\frac{d}{dt}\left[U^\dagger(t, t_0)\, U(t, t_0)\right] = \frac{1}{i\hbar}\left(-U^\dagger(t, t_0)\, H U(t, t_0) + U^\dagger(t, t_0)\, H U(t, t_0)\right) = 0 \tag{260}$$

$$U^\dagger(t_0, t_0)\, U(t_0, t_0) = I \tag{261}$$

$$U^{\dagger}(t,t_0)\,U(t,t_0)=I\Longrightarrow U^{\dagger}(t,t_0)=U(t,t_0)^{-1}=U(t_0,t)) \tag{262}$$

Operátorok mátrixeleme (explicit időfüggést megengedve)

$$a_{12}^{S}(t)=\left\langle\psi_1^S(t)\right|A^S(t)\left|\psi_2^S(t)\right\rangle=\langle\varphi_1|\,U^{\dagger}(t,t_0)\,A^S(t)\,U(t,t_0)\,|\varphi_2\rangle \tag{263}$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}a_{12}^{S}(t)=&-\frac{1}{i\hbar}\left\langle\psi_1^S(t)\right|H^SA^S(t)\left|\psi_2^S(t)\right\rangle+\frac{1}{i\hbar}\left\langle\psi_1^S(t)\right|A^S(t)\,H^S\left|\psi_2^S(t)\right\rangle\\&+\left\langle\psi_1^S(t)\right|\partial_tA^S(t)\left|\psi_2^S(t)\right\rangle\\=&\left\langle\psi_1^S(t)\right|-\frac{1}{i\hbar}\left[H^S,A^S(t)\right]+\partial_tA^S(t)\left|\psi_2^S(t)\right\rangle\end{aligned} \tag{264}$$

4.2. Heisenberg kép

Operátorok és hullámfüggvény:

$$A^H(t)=U^{\dagger}(t,t_0)\,A^S(t)\,U(t,t_0) \tag{265}$$

$$\psi^H(t)=U^{\dagger}(t,t_0)\,\psi^S(t)=\psi^S(t_0)=\varphi \tag{266}$$

Operátorok mozgásegyenlete:

$$\begin{aligned}\underline{\frac{d}{dt}A^H(t)}=&\frac{1}{i\hbar}\left(-U^{\dagger}(t,t_0)\,H^SA^S(t)\,U(t,t_0)+U^{\dagger}(t,t_0)\,A^S(t)\,H^SU(t,t_0)\right)\\&+U^{\dagger}(t,t_0)\,\partial_tA^S(t)\,U(t,t_0)\end{aligned} \tag{267}$$

$$\underline{=-\frac{1}{i\hbar}\left[H^H(t)\,,A^H(t)\right]+\partial_tA^H(t)} \tag{268}$$

ahol

$$H^H(t)=U^{\dagger}(t,t_0)\,H^SU(t,t_0) \tag{269}$$

$$\partial_tA^H(t)=U^{\dagger}(t,t_0)\,\partial_tA^S(t)\,U(t,t_0) \tag{270}$$

Hamilton operátor időfüggése:

$$\frac{d}{dt}H^H(t)=\frac{1}{i\hbar}\Big(-U^{\dagger}(t,t_0)\left(H^S\right)^2U(t,t_0)+U^{\dagger}(t,t_0)\left(H^S\right)^2U(t,t_0)\Big)=0 \tag{271}$$

$$\underline{H^H(t)=H^S} \tag{272}$$

Operátorok mátrixeleme:

$$a_{12}^H(t)=\left\langle\psi_1^H\right|A^H(t)\left|\psi_2^H\right\rangle=\left\langle\psi_1^S(t)\right|A^S(t)\left|\psi_2^S(t)\right\rangle=a_{12}^S(t) \tag{273}$$

$$\frac{d}{dt}a_{12}^H(t)=\left\langle\psi_1^H\right|-\frac{1}{i\hbar}\left[H^H(t)\,,A^H(t)\right]+\partial_tA^H(t)\left|\psi_2^H\right\rangle \tag{274}$$

4.3. Dirac (kölcsönhatási) kép

Időfüggő perturbáció

$$H^S(t) = H_0^S + V^S(t) \tag{275}$$

Operátorok a Dirac képben

$$U(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0^S(t-t_0)} \tag{276}$$

$$\underline{A^D(t) = U^\dagger(t,t_0)\, A^S(t)\, U(t,t_0)} \tag{277}$$

Az operátorok mozgásegyenlete

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}A^D(t) = &-\frac{1}{i\hbar}U^\dagger(t,t_0)\, H_0^S A^S(t)\, U(t,t_0) + \frac{1}{i\hbar}U^\dagger(t,t_0)\, A^S(t)\, H_0^S U(t,t_0)\\ &+ U^\dagger(t,t_0)\, \partial_t A^S(t)\, U(t,t_0) \qquad (278)\\ =& -\frac{1}{i\hbar}\left[H_0^D(t), A^D(t)\right] + U^\dagger(t,t_0)\, \partial_t A^S(t)\, U(t,t_0) \qquad (279)\end{aligned}$$

$$\frac{d}{dt}H_0^D(t) = 0 \Longrightarrow H_0^D(t) = H_0^S = H_0 \tag{280}$$

$$\underline{\frac{d}{dt}A^D(t) = -\frac{1}{i\hbar}\left[H_0, A^D(t)\right] + \partial_t A^D(t)} \tag{281}$$

$$\partial_t A^D(t) = U^\dagger(t,t_0)\, \partial_t A^S(t)\, U(t,t_0) \tag{282}$$

Állapotfüggvények a Dirac képben

$$\underline{\psi^D(t) = U^\dagger(t,t_0)\, \psi^S(t)} \tag{283}$$

$$\psi^D(t_0) = \psi^S(t_0) = \varphi \tag{284}$$

Mozgásegyenlet

$$\begin{aligned}\underline{i\hbar\partial_t\psi^D(t)} &= i\hbar\partial_t U^\dagger(t,t_0)\, \psi^S(t) + i\hbar U^\dagger(t,t_0)\, \partial_t\psi^S(t) \qquad (285)\\ &= -U^\dagger(t,t_0)\, H_0\psi^S(t) + U^\dagger(t,t_0)\left(H_0 + V^S(t)\right)\psi^S(t) \qquad (286)\\ &= U^\dagger(t,t_0)\, V^S(t)\, \psi^S(t) = \underline{V^D(t)\, \psi^D(t)} \qquad (287)\end{aligned}$$

ahol

$$V^D(t) = U^\dagger(t,t_0)\, V^S(t)\, U(t,t_0) \tag{288}$$

Operátorok mátrixelemeinek időfüggése:

$$a_{12}(t) = \left\langle \psi_1^D(t)\right| A^D(t) \left|\psi_2^D(t)\right\rangle \tag{289}$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}a_{12}(t) = &-\frac{1}{i\hbar}\left\langle \psi_1^D(t)\right| V^D(t)\, A^D(t) \left|\psi_2^D(t)\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\left\langle \psi_1^D(t)\right| A^D(t)\, V^D(t) \left|\psi_2^D(t)\right\rangle \qquad (290)\\ &-\frac{1}{i\hbar}\left\langle \psi_1^D(t)\right| \left[H_0, A^D(t)\right] \left|\psi_2^D(t)\right\rangle + \left\langle \psi_1^D(t)\right| \partial_t A^D(t) \left|\psi_2^D(t)\right\rangle \qquad (291)\\ =& -\frac{1}{i\hbar}\left\langle \psi_1^D(t)\right| \left[H^D(t), A^D(t)\right] \left|\psi_2^D(t)\right\rangle + \left\langle \psi_1^D(t)\right| \partial_t A^D(t) \left|\psi_2^D(t)\right\rangle \qquad (292)\end{aligned}$$

A hullámfüggvény időfejlődését leíró operátor:

$$\underline{\psi^D(t) = S(t,t_0)\,\psi^D(t_0) = S(t,t_0)\,\varphi} \tag{293}$$

$$S(t_0,t_0) = I \tag{294}$$

$$\partial_t \psi^D(t) = -\frac{i}{\hbar} V^D(t)\,\psi^D(t) \tag{295}$$

$$\Downarrow$$

$$\underline{\frac{d}{dt} S(t,t_0) = -\frac{i}{\hbar} V^D(t)\, S(t,t_0)} \tag{296}$$

$$\Downarrow$$

$$\underline{S(t,t_0) = I - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V^D(t')\, S(t',t_0)\, dt'} \tag{297}$$

Megoldás:

$$S(t,t_0) = \sum_{k=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k\, V^D(t_1)\, V^D(t_2) \ldots V^D(t_k) \tag{298}$$

ami szukcesszív iterációval könnyen bizonyítható.

A fenti kifejezés formálisan kompaktabb alakra hozható, ha bevezetjük az operátorok időrendezett szorzatát:

$$T\left[V^D(t_1)\, V^D(t_2) \ldots V^D(t_k)\right] = V^D(t_{i_1})\, V^D(t_{i_2}) \ldots V^D(t_{i_k}) \tag{299}$$
$$t_{i_l} \in \{t_1, t_2, \ldots, t_k\} \;\; (l = 1, 2, \ldots, k)$$
$$t_{i_1} > t_{i_2} > t_{i_3} \ldots > t_{k-1} > t_k$$

Állítás:

$$S(t,t_0) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t} dt_k\, T\left[V^D(t_1)\, V^D(t_2) \ldots V^D(t_k)\right] \tag{300}$$

$$\underline{\doteqdot T \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' V^D(t')\right)} \tag{301}$$

ahol a második kifejezést az exponenciális függvény Taylor-sora alapján vezettük be.

Bizonyítás:

Vegyünk általánosságban egy $f(t_1, t_2, \ldots, t_k)$ (operátor)függvényt, mely a változók felcserélésére nem (feltétlenül) szimmetrikus. Vizsgáljuk meg először közvetlenül a $k = 2$

$$\begin{aligned}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2\, T\, f(t_1,t_2) &= \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, f(t_1,t_2) + \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1\, f(t_2,t_1) \\ &= 2\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, f(t_1,t_2)\end{aligned} \tag{302}$$

és $k=3$

$$\begin{aligned}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t} dt_3\, T\, f(t_1,t_2,t_3) &= \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3\, f(t_1,t_2,t_3) \\ &+ \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_3 \int_{t_0}^{t_3} dt_2\, f(t_1,t_3,t_2) \\ &+ \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_3\, f(t_2,t_1,t_3) \\ &+ \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 \int_{t_0}^{t_3} dt_1\, f(t_2,t_3,t_1) \\ &+ \int_{t_0}^{t} dt_3 \int_{t_0}^{t_3} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_3\, f(t_3,t_1,t_2) \\ &+ \int_{t_0}^{t} dt_3 \int_{t_0}^{t_3} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1\, f(t_3,t_2,t_1) \\ &= 6\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3\, f(t_1,t_2,t_3) \end{aligned} \tag{303}$$

eseteket. Ezek alapján látható, hogy általános esetben a (300) egyenlet baloldalán szereplő integrálban az integrálási tartományt $k!$ részre bonthatjuk, ahol a $t_1, t_2 \ldots, t_k$ változók határozottan rendezettek (a legnagyobb változót k-féleképpen választhatjuk ki, az utána következőt $k-1$-féleképpen stb.) A $k!$ integrálban a változókat célszerűen átnevezve látjuk, hogy azok mindegyike a jobboldalon álló integrállal egyezik meg.

Kapcsolat az időfüggő perturbációszámítással:

$$S^{(1)}(t,t_0) = I - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V^D(t')\,dt' = I - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} e^{\frac{i}{\hbar}H_0^S(t'-t_0)} V^S(t')\, e^{-\frac{i}{\hbar}H_0^S(t'-t_0)} dt' \tag{304}$$

$$\psi^{D(1)}(t) = |\varphi\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} e^{\frac{i}{\hbar}H_0^S(t'-t_0)} V^S(t')\, e^{-\frac{i}{\hbar}H_0^S(t'-t_0)}\,\varphi\, dt' \tag{305}$$

Az állapotfüggvény Schrödinger képben:

$$\begin{aligned}\psi^{S(1)}(t) &= U(t,t_0)\,\varphi - \frac{i}{\hbar}U(t,t_0)\int_{t_0}^{t} e^{\frac{i}{\hbar}H_0^S(t'-t_0)} V^S(t')\, e^{-\frac{i}{\hbar}H_0^S(t'-t_0)}\,\varphi\, dt' && (306)\\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}H_0^S(t-t_0)}\varphi - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} e^{-\frac{i}{\hbar}H_0^S(t-t')} V^S(t')\, e^{-\frac{i}{\hbar}H_0^S(t'-t_0)}\,\varphi\, dt' && (307)\end{aligned}$$

t_0-ban H_0^S egy sajátállapotából indulunk:

$$H_0^S = \sum_n \varepsilon_n |n\rangle\langle n| \tag{308}$$

$$\psi(t_0) = \varphi = |k\rangle \tag{309}$$

$$\psi^{S(1)}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k(t-t_0)}|k\rangle - \frac{i}{\hbar}\sum_n \int_{t_0}^{t} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n(t-t')}|n\rangle\langle n|V^S(t')|k\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k(t'-t_0)}dt'$$
$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k(t-t_0)}|k\rangle - \frac{i}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k t_0}\sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}\,|n\rangle\int_{t_0}^{t} e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_n-\varepsilon_k)t'}\langle n|V^S(t')|k\rangle\,dt'$$
$$= e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k t_0}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k t}|k\rangle - \frac{i}{\hbar}\sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}\,|n\rangle\int_{t_0}^{t} e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_n-\varepsilon_k)t'}\langle n|V^S(t')|k\rangle\,dt'\right)$$
$$= e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k t_0}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k t}\left[1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}V_{kk}^S(t')\,dt'\right]|k\rangle\right.$$
$$\left. -\frac{i}{\hbar}\sum_{n(\neq k)} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}\,|n\rangle\int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{nk}t'}V_{nk}^S(t')\,dt'\right) \tag{310}$$

$$\omega_{nk} = \frac{\varepsilon_n - \varepsilon_k}{\hbar} \tag{311}$$

$t_0 = 0$ választással a Schrödinger képben a hullámfüggvény tehát felírható az alábbi alakban:

$$\psi^{S(1)}(t) = \sum_n c_n^{(1)}(t)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}\,|n\rangle \tag{312}$$

ahol

$$c_k^{(1)}(t) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}V_{kk}^S(t')\,dt' \tag{313}$$

és $n \neq k$ esetben

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{nk}t'}V_{nk}^S(t')\,dt'\ . \tag{314}$$

Ez utóbbi eredmény megegyezik azzal, amit az elsőrendű időfüggő perturbációszámítással kaptunk.

5. Mozgás elektromágneses térben

A relativisztikus Hamilton függvény

$$H\left(\vec{r}, \vec{p}\right) = \sqrt{m^2c^4 + c^2\left(\vec{p} - q\vec{A}\right)^2} + V \tag{315}$$

Nem-relativisztikus közelítésben:

$$H = \frac{\left(\vec{p} - q\vec{A}\right)^2}{2m} + V\,. \tag{316}$$

ahol $\vec{p}$ a *kanonikus impulzus* és

$$\vec{K} = \vec{p} - q\vec{A} = m\vec{v} \tag{317}$$

a *kinetikus impulzus.*

5.1. Kanonikus kvantálás

Két dinamikai mennyiség, $f\,(q,p,t)$ és $g\,(q,p,t)$, Poisson zárójele

$$\{f,g\} = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i}\right)\,. \tag{318}$$

Nyilvánvalóan

$$\{q_i, q_j\} = 0\,, \tag{319}$$
$$\{p_i, p_j\} = 0\,, \tag{320}$$
$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}\,. \tag{321}$$

A Hamiltoni mechanika mozgásegyenletei átfogalmazhatók a Poisson zárójel használatával:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \{q_i, H\}\,, \tag{322}$$
$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = \{p_i, H\}\,. \tag{323}$$

A dinamikai mennyiségek teljes időderiváltja:

$$\begin{aligned}\frac{df}{dt} &= \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i}\dot{p}_i\right) + \frac{\partial f}{\partial t}\\ &= \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right) + \frac{\partial f}{\partial t}\\ &= \{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial t}\,.\end{aligned} \tag{324}$$

A *kanonikus kvantálás* a dinamikai mennyiségekhez úgy rendel operátorokat, hogy a Poisson zárójeles kifejezések helyébe a megfelelő operátorok kommutátorat helyettesítjük. Pontosabban,

$$\text{ha}\;\; \{f,g\} = c\,,\text{akkor}\;\; \left[\hat{f}, \hat{g}\right] = i\hbar\,\hat{c}\,. \tag{325}$$

A kanonikus változókra tehát (most már elhagyva a 'kalapos' jelölést),

$$[q_i, q_j] = 0 \ , \tag{326}$$
$$[p_i, p_j] = 0 \ , \tag{327}$$
$$[q_i, p_j] = i\hbar\, \delta_{ij} \ . \tag{328}$$

Teljes indukcióval könnyen belátható, hogy

$$[q_j, p_i^n] = i\hbar\, n\, p_i^{n-1} \delta_{ij}$$

és

$$[p_j, q_i^n] = -i\hbar\, n\, q_i^{n-1} \delta_{ij} \ ,$$

ahol $n \in \mathbb{N}$. A Hamilton-függvény Taylor-sorába,

$$H\left(q, p\right) = \sum_{k,l=0}^{\infty} \sum_{i,j=1}^{N} a_{ij}^{kl} q_i^k p_j^l \ ,$$

($a_{ij}^{kl} \in \mathbb{R}$) a q_i és p_j operátorokat behelyettesítve definiáljuk a Hamilton-operátort,

$$H\left(q, p\right) = \frac{1}{2} \sum_{k,l=0}^{\infty} \sum_{i,j=1}^{N} a_{ij}^{kl} \left(q_i^k p_j^l + p_j^l q_i^k \right) \ ,$$

ahol a szimmetrizálással biztosítottuk, hogy H hermitikus legyen. Fennállnak a következő kommutátor relációk:

$$\begin{aligned}
[q_n, H] &= \frac{1}{2} \sum_{k,l=0}^{\infty} \sum_{i,j=1}^{N} a_{ij}^{kl} \left(q_i^k \left[q_n, p_j^l\right] + \left[q_n, p_j^l\right] q_i^k \right) \\
&= \frac{i\hbar}{2} \sum_{k,l=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{N} l a_{in}^{kl} \left(q_i^k p_n^{l-1} + p_n^{l-1} q_i^k \right) = i\hbar \frac{\partial H}{\partial p_n}
\end{aligned}$$

és hasonlóan,

$$[p_n, H] = -i\hbar \frac{\partial H}{\partial q_n} \ .$$

Itt a $\frac{\partial H}{\partial p_n}$ és $\frac{\partial H}{\partial q_n}$ operátorokat a Hamilton-függvény parciális deriváltjaiból hasonlóan képezzük, mint a Hamilton-operátort. A Hamilton mozgásegyenletekkel analógiában vezetjük be a q_i és p_i operátorok Heisenberg-képbeli időderiváltjait,

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [q_i, H] \ , \tag{329}$$
$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [p_i, H] \ , \tag{330}$$

melyek valóban a klasszikus mozgásegyenletek Poisson zárójeles felírásának kvantált alakjai.

5.2. A kinetikus impulzus csererelációi

Megtartva a kanonikus változók közötti felcserélési relációt,

$$[p_i, x_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \tag{331}$$

koordináta reprezentációban továbbra is fennáll a

$$\overrightarrow{p} = \frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla} \tag{332}$$

egyenlőség. Következésképpen:

$$\overrightarrow{K} = \frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla} - q\overrightarrow{A}\,. \tag{333}$$

A kinetikus impulzus operátorok felcserélési relációja:

$$\begin{aligned}[K_i, K_j] &= i\hbar q\left([\partial_i, A_j] + [A_i, \partial_j]\right) \\ &= i\hbar q\left(\partial_i A_j - A_j\partial_i + A_i\partial_j - \partial_j A_i\right) \\ &= i\hbar q\left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right) = i\hbar q\,\varepsilon_{ijk}B_k\,. \end{aligned} \tag{334}$$

Innen egyből következik (l. impulzusmomentum operátorok), hogy

$$\overrightarrow{K} \times \overrightarrow{K} = i\hbar q\,\overrightarrow{B}\,. \tag{335}$$

A kinetikus impulzus és a koordináta operátorok felcserélési relációja:

$$[K_i, x_j] = [p_i, x_j] = \frac{\hbar}{i}\delta_{ij}\,. \tag{336}$$

5.3. A Schrödinger-egyenlet

A következőkben a

$$H = \frac{\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right)^2}{2m} + V \tag{337}$$

Hamilton operátor alakját vizsgáljuk koordináta reprezentációban:

$$\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla} - q\overrightarrow{A}\right)^2 = -\hbar^2\Delta + q^2A^2 - \frac{\hbar q}{i}\left(\overrightarrow{\nabla}\overrightarrow{A} + \overrightarrow{A}\overrightarrow{\nabla}\right) \tag{338}$$

$$\partial_i A_i + A_i\partial_i = \frac{\partial A_i}{\partial x_i} + 2A_i\partial_i \quad\longrightarrow\quad \overrightarrow{\nabla}\overrightarrow{A} + \overrightarrow{A}\overrightarrow{\nabla} = div\overrightarrow{A} + 2\overrightarrow{A}\overrightarrow{\nabla}\,, \tag{339}$$

ezért *Coulomb mértékben* $\left(div\overrightarrow{A} = 0\right)$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V + \frac{q^2}{2m}A^2 + \frac{i\hbar q}{m}\overrightarrow{A}\overrightarrow{\nabla}\,, \tag{340}$$

azaz az időtől függő Schrödinger egyenlet

$$i\hbar\partial_t\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right) + V\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right) + \frac{q^2}{2m}A^2\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right) + \frac{i\hbar q}{m}\overrightarrow{A}\overrightarrow{\nabla}\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right)\,. \tag{341}$$

(Megjegyzés: elektronra $q = -e$, ahol e az elemi töltés.)

5.4. Paramágneses és diamágneses kölcsönhatás

Homogén (térben állandó nagyságú és irányú) mágneses tér esetén, Coulomb mértékben a vektorpotenciál felírható az

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r} \tag{342}$$

alakban. Ugyanis

$$div\vec{A} = \partial_i A_i = \frac{1}{2}\,\varepsilon_{ijk}\,B_j\,\partial_i x_k = \frac{1}{2}\,\varepsilon_{ijk}\,\delta_{ik}\,B_j = \frac{1}{2}\,\varepsilon_{kjk}\,B_j = 0 \tag{343}$$

valamint

$$\begin{aligned}\left(\vec{\nabla} \times \vec{A}\right)_i &= \frac{1}{2}\,\varepsilon_{ijk}\,\varepsilon_{klm}\,\partial_j\left(B_l\,x_m\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(\delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl}\right)\delta_{jm}\,B_l = \frac{1}{2}\left(3B_i - B_i\right) = B_i\,.\end{aligned} \tag{344}$$

Ezt nevezzük *szimmetrikus mérték*nek. Ekkor az (341) Schrödinger-egyenlet utolsó tagját a következőképpen alakíthatjuk át:

$$\begin{aligned}\frac{i\hbar q}{m}\vec{A}\vec{\nabla}\psi &= \frac{i\hbar q}{2m}\left(\vec{B} \times \vec{r}\right)\left(\vec{\nabla}\psi\right) = \frac{i\hbar q}{2m}\left(\vec{r} \times \left(\vec{\nabla}\psi\right)\right)\vec{B} \\ &= \frac{i\hbar q}{2m}\left(\vec{r} \times \vec{\nabla}\right)\left(\vec{B}\psi\right) - \frac{i\hbar q}{2m}\left[\left(\vec{r} \times \vec{\nabla}\right)\vec{B}\right]\psi\,.\end{aligned} \tag{345}$$

A második tagban $\vec{B}$ deriváltjai fordulnak elő, melyek konstans mágneses tér esetén eltűnnek. Felhasználva, hogy $\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$, a (340) operátor utolsó tagja tehát a

$$\frac{i\hbar q}{m}\vec{A}\vec{\nabla} = -\frac{q}{2m}\left(\vec{r} \times \vec{p}\right)\vec{B} = -\frac{q}{2m}\vec{L}\,\vec{B} = -\vec{M}_L\vec{B}\,,$$

alakra hozható, ahol (ismételten a $q = -e$ választással)

$$\vec{M}_L = \frac{q}{2m}\vec{L} = -\mu_B\frac{\vec{L}}{\hbar}\,, \tag{346}$$

e az elemi töltés, m az elektron tömege és $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9.27 \times 10^{-24}$ J/T a Bohr-magneton. Ezt hívjuk *Pauli paramágneses tagnak,* mely a spin figyelembevételével

$$H_{para} = -\left(\vec{M}_L + 2\vec{M}_S\right)\vec{B} = \frac{\mu_B}{\hbar}\left(\vec{L} + 2\,\vec{S}\right)\vec{B}\,. \tag{347}$$

Közönséges Zeemann effektus: Homogén, z irányú mágneses térben a H-atom energianívói a perturbációszámítás első rendjében a következőképpen hasadnak fel:

$$E_{n\ell m_\ell m_s} = E_n^{(0)} + \mu_B\left(m_\ell + 2m_s\right)B\,. \tag{348}$$

Érdekes, hogy a felhasadás mértéke $\frac{\mu_B B}{\hbar} = \frac{qB}{2m}$, éppen az elektrodinamikából ismert Larmour körfrekvenciának megfelelő energia. A felhasadás a pályamomentum szerint $2\ell + 1$-szeres, a spinmomentum szerint 2-szeres, így $2\,(2\ell + 1)$ nívó alakulhatna ki. A pályamomentum és spin kvantumszámok fenti kombinációjából azonban kiderül, hogy összesen $2\ell + 3$ nívó van, melyek közül 4 nívó egyszeresen, $2\ell - 1$ nívó pedig kétszeresen elfajult: $2\,(2\ell - 1) + 4 = 2\,(2\ell + 1)$. (Valójában ezt a felhasadást a relativisztikus spin-pálya kölcsönhatás erősen módosíthatja, l. Relativisztikus kvantummechanika).

Páratlan rendszámú atomok esetében külső mágneses tér nélkül is megfigyelhető az atomi pályák felhasadása. Ezt *anomális Zeemann effektus*nak hívjuk.

A (340) Hamilton operátor második tagja

$$\frac{q^2}{2m}A^2 = \frac{q^2}{8m}\left(\overrightarrow{B}\times\overrightarrow{r}\right)^2 = \frac{q^2}{8m}\left(r^2B^2 - \left(\overrightarrow{r}\,\overrightarrow{B}\right)^2\right) = \frac{q^2B^2}{8m}\left(x^2+y^2\right) \tag{349}$$

az ún. *Langevin diamágneses tag*, ahol az utolsó kijezést z irányú mágneses tér esetében kapjuk. Ez a legtöbb esetben elhanyagolható a paramágneses járulékhoz képest,

$$\frac{\delta E_{dia}}{\delta E_{para}} = \frac{e^2B^2}{8m}\left(\frac{eB}{2m}\right)^{-1}\frac{|\langle x^2+y^2\rangle|}{|\langle L_z+2S_z\rangle|} \simeq \frac{ea_0^2}{4\hbar}B\,. \tag{350}$$

A fenti becslésben kihasználtuk, hogy atomokban $|\langle x^2+y^2\rangle| \sim a_0^2$, valamint $|\langle L_z+2S_z\rangle| \sim \hbar$. Kiszámítható, hogy az atomi energiaszinteken fellépő paramágneses korrekció $10^{-14}B$ (T) nagyságrendű. Amennyiben viszont a paramágneses tag eltűnik, $\langle L_z+2S_z\rangle = 0$, a diamágneses járulék dominál.

Vegyük észre, hogy a paramágneses járulék a már meglevő $\overrightarrow{\mu} = \frac{\mu_B}{\hbar}\left\langle \overrightarrow{L} + 2\overrightarrow{S}\right\rangle$ atomi mágneses momentumnak a mágneses indukció irányába való fordulása miatt lép föl. Ezzel szemben a Langevin diamágnesség a mágneses tér hatására indukált mágneses momentummal kapcsolatos:

$$\begin{aligned}\overrightarrow{\mu}_{dia} &= -\frac{\partial E_{dia}}{\partial\overrightarrow{B}} = -\frac{e^2}{8m}\frac{\partial\left\langle\left(\overrightarrow{B}\times\overrightarrow{r}\right)^2\right\rangle}{\partial\overrightarrow{B}} \\ &= -\frac{e^2}{4m}\left(\langle r^2\rangle\overrightarrow{B} - \left\langle\overrightarrow{r}\left(\overrightarrow{r}\,\overrightarrow{B}\right)\right\rangle\right) \underset{\overrightarrow{B}\parallel\overrightarrow{e}_z}{=} -\frac{e^2B}{4m}\langle x^2+y^2\rangle\overrightarrow{e}_z\,,\end{aligned} \tag{351}$$

amely tehát a külső mágneses tér nagyságával egyenes arányos, de vele ellentétes irányú. A lineáris válaszelmélet keretein belül tárgyalva bevezethetjük a diamágneses szuszceptibilitás tenzort

$$\underline{\chi}_{dia} = -\frac{e^2}{4m}\left(\langle r^2\rangle\underline{I} - \langle\overrightarrow{r}\circ\overrightarrow{r}\rangle\right)$$

(ahol $\underline{I}$ a $3x3$-as egységmátrix), mellyel

$$\overrightarrow{\mu}_{dia} = \underline{\chi}_{dia}\overrightarrow{B}$$

és

$$\delta E_{dia} = -\frac{1}{2}\overrightarrow{B}\,\overrightarrow{\mu}_{dia} = -\frac{1}{2}\overrightarrow{B}\,\underline{\chi}_{dia}\overrightarrow{B}\,.$$

5.5. A valószínűségi áramsűrűség elektromágneses tér jelenlétében

A korábbi tárgyaláshoz hasonlóan, elektromágneses tér jelenlétében is levezethető egy kontinuitási egyenlet, mely lehetővé teszi a hullámfüggvény valószínűségi értelmezését. Induljunk ki a

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \frac{q^2}{2m}\overrightarrow{A}^2\psi + \frac{i\hbar q}{2m}\left(div\,\overrightarrow{A} + 2\,\overrightarrow{A}\,\overrightarrow{\nabla}\right)\psi + V\psi + \mu_B\,\overrightarrow{B}\,\overrightarrow{\sigma}\,\psi \tag{352}$$

időtől függő Pauli-Schrödinger egyenletből, ahol figyelembe vettük a mágneses tér és az elektron spin közötti kölcsönhatást és

$$\psi = \begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} \tag{353}$$

a kétkomponensű hullámfüggvény. Komponensenként kiírva

$$i\hbar\partial_t\psi_r = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_r + \frac{q^2}{2m}\vec{A}^2\psi_r + \frac{i\hbar q}{2m}\left(div\,\vec{A} + 2\,\vec{A}\,\vec{\nabla}\right)\psi_r + V\psi_r + \mu_B B_i\,\sigma_i^{rs}\,\psi_s \qquad (r=1,2)\ . \tag{354}$$

ahol σ_i^{rs} az i-ik ($i = x, y, z$) Pauli mátrix komponenseit jelöli ($r, s = 1, 2$), melyekre természetesen fennáll, hogy $\sigma_i^{rs} = (\sigma_i^{sr})^*$. A fenti egyenletet konjugálva nyerjük

$$-i\hbar\partial_t^*\psi_r = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_r^* + \frac{q^2}{2m}\vec{A}^2\psi_r - \frac{i\hbar q}{2m}\left(div\,\vec{A} + 2\,\vec{A}\,\vec{\nabla}\right)\psi_r^* + V\psi_r^* + \mu_B B_i\,\psi_s^*\sigma_i^{sr} \qquad (r=1,2)\ , \tag{355}$$

amit írhatunk a

$$-i\hbar\partial_t\psi^\dagger = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^\dagger + \frac{q^2}{2m}\vec{A}^2\psi^\dagger - \frac{i\hbar q}{2m}\left(div\,\vec{A} + 2\,\vec{A}\,\vec{\nabla}\right)\psi^\dagger + V\psi^\dagger + \mu_B\,\psi^\dagger\vec{B}\vec{\sigma} \tag{356}$$

kompakt formában is, ahol

$$\psi^\dagger = \left(\ \psi_1^*\ ,\ \ \psi_2^*\ \right)\ .$$

A (352) és (356) egyenletek felhasználásával adódik, hogy

$$\begin{aligned} i\hbar\left(\psi^\dagger\partial_t\Psi + \left[\partial_t\psi^\dagger\right]\psi\right) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^\dagger\Delta\psi - \left[\Delta\psi^\dagger\right]\psi\right) \\ &+ \frac{i\hbar q}{mc}\left(\left[\vec{\nabla}\vec{A}\right]\psi^\dagger\psi + \vec{A}\,\psi^\dagger\left[\vec{\nabla}\psi\right] + \vec{A}\left[\vec{\nabla}\psi^\dagger\right]\psi\right)\ , \end{aligned} \tag{357}$$

ahol a szögletes zárójelek most expliciten azt jelzik, hogy a megfelelő differenciáloperátorok mely függvényekre hatnak. Figyelemreméltó, hogy a Pauli-Schrödinger egyenlet spinoperátort tartalmazó része kiesett. A fenti egyenlet mindkét oldalán átalakításokat végezve:

$$\psi^\dagger\partial_t\psi + \left[\partial_t\psi\right]^\dagger\psi = \partial_t\left(\psi^\dagger\psi\right)\ ,$$

$$\psi^\dagger\Delta\psi - \left[\Delta\psi^\dagger\right]\psi = \vec{\nabla}\left(\psi^\dagger\vec{\nabla}\psi - \left[\vec{\nabla}\psi^\dagger\right]\psi\right)\ ,$$

illetve

$$\left[\vec{\nabla}\vec{A}\right]\psi^\dagger\psi + \vec{A}\,\psi^\dagger\left[\vec{\nabla}\psi\right] + \vec{A}\left[\vec{\nabla}\psi^\dagger\right]\psi = \vec{\nabla}\left[\vec{A}\,\psi^\dagger\psi\right]\ ,$$

a következő kontinuitási egyenlethez jutunk:

$$\partial_t\rho + \vec{\nabla}\,\vec{j} = 0\,, \tag{358}$$

ahol

$$\rho = \psi^\dagger\psi \tag{359}$$

és

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\left[\vec{\nabla}\psi^\dagger\right]\psi - \psi^\dagger\,\vec{\nabla}\psi\right) - \frac{q}{m}\vec{A}\,\psi^\dagger\psi\,. \tag{360}$$

Látható, hogy a valószínűségsűrűség kifejezése megegyezik az elektromágneses tér (vektorpotenciál) nélkül levezetett eredménnyel, míg viszont a valószínűségi áramsűrűségben expliciten megjelenik a vektorpotenciál hatása. Ezt úgy érthetjük meg, hogy az *áramsűrűséget* a *kinetikus* (és nem a kanonikus) *impulzussal* hozzuk kapcsolatba:

$$\vec{j} = \frac{1}{m}\,\mathrm{Re}\left(\psi^\dagger\vec{K}\psi\right) = -\frac{i\hbar}{2m}\{\psi^\dagger\left[\vec{\nabla}\psi\right] - \underbrace{\left(\psi^\dagger\left[\vec{\nabla}\psi\right]\right)^+}_{=\left[\vec{\nabla}\psi^\dagger\right]\psi}\} - \frac{q}{m}\vec{A}\psi^\dagger\psi\,. \tag{361}$$

Megjegyezzük, hogy az áramsűrűséghez egy divergenciamentes (mágnesezettségi) tagot hozzáadva a kontinuitási egyenlet érvényben marad. Az itt közölt levezetés nem ad információt arra nézve, hogy a spin mágnesezettségnek milyen áramsűrűség feleltethető meg. Erre a problémára a Dirac egyenlet nem-relativisztikus határesetének tárgyalásakor vissza fogunk térni.

5.6. Mértéktranszformáció

Az elektromos térerősség

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla}\phi \tag{362}$$

és a mágneses indukció

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \tag{363}$$

az

$$\vec{A}'(\vec{r},t) = \vec{A}(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\Lambda(\vec{r},t) \qquad \phi'(\vec{r},t) = \phi(\vec{r},t) - \partial_t\Lambda(\vec{r},t) \tag{364}$$

mértéktranszformáció erejéig meghatározottak, ahol ϕ a skalárpotenciál. $V = q\phi$ választással az

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{r},t) = \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - q\vec{A}(\vec{r},t)\right)^2 + q\phi(\vec{r},t)\right]\psi(\vec{r},t) \tag{365}$$

időtől függő Schrödinger egyenlet a mértéktranszformáció hatására a

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi'(\vec{r},t) &= \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - q\vec{A}'(\vec{r},t)\right)^2 + q\phi'(\vec{r},t)\right]\psi'(\vec{r},t) \\ &= \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - q\vec{A}(\vec{r},t) - q\vec{\nabla}\Lambda(\vec{r},t)\right)^2 + q\phi(\vec{r},t) - q\partial_t\Lambda(\vec{r},t)\right]\psi'(\vec{r},t) \end{aligned} \tag{366}$$

alakba megy át.

Állítás: Ha $\psi'(\vec{r},t)$ a (366) egyenlet megoldása, akkor a

$$\psi(\vec{r},t) = \psi'(\vec{r},t)\exp\left(-\frac{iq}{\hbar}\Lambda(\vec{r},t)\right) \tag{367}$$

függvény a (365) egyenlet megoldása. Következésképpen a mértéktranszformált hullámfüggvény,

$$\psi'(\vec{r},t) = \psi(\vec{r},t)\exp\left(\frac{iq}{\hbar}\Lambda(\vec{r},t)\right) . \tag{368}$$

Bizonyítás: A

$$i\hbar\partial_t\left[\exp\left(\frac{iq}{\hbar}\Lambda(\vec{r},t)\right)\psi(\vec{r},t)\right] = \exp\left(\frac{iq}{\hbar}\Lambda(\vec{r},t)\right)\left(i\hbar\partial_t - q\partial_t\Lambda(\vec{r},t)\right)\psi(\vec{r},t) \tag{369}$$

azonosságot behelyettesítve a (366) egyenletbe, majd némi átrendezés után kapjuk az alábbi egyenletet,

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi(\vec{r},t) =& \frac{1}{2m}e^{-\frac{iq}{\hbar}\Lambda(\vec{r},t)}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - q\vec{A}(\vec{r},t) - q\vec{\nabla}\Lambda(\vec{r},t)\right)^2 e^{\frac{iq}{\hbar}\Lambda(\vec{r},t)}\psi(\vec{r},t) \\ &+ q\phi(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t) \ . \end{aligned} \tag{370}$$

Egyszerűsítésképpen vezessük be az $f(\vec{r},t) = q\Lambda(\vec{r},t)$ és $\vec{g}(\vec{r},t) = -q\vec{A}(\vec{r},t)$ függvényeket és számítsuk ki a fenti egyenlet jobboldalán szereplő első tagot (a függvények argumentumait nem jelölve):

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar}f}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + \vec{g} - \vec{\nabla}f\right)e^{\frac{i}{\hbar}f}\psi &= \frac{\hbar}{i}e^{-\frac{i}{\hbar}f}\,\vec{\nabla}\left(e^{\frac{i}{\hbar}f}\,\psi\right) + \left(\vec{g} - \vec{\nabla}f\right)\psi \\ &= \left(\vec{\nabla}f\right)\psi + \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi + \left(\vec{g} - \vec{\nabla}f\right)\psi = \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + \vec{g}\right)\psi\,, \end{aligned}$$

majd

$$e^{-\frac{i}{\hbar}f}\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}+\overrightarrow{g}-\overrightarrow{\nabla}f\right)^2 e^{\frac{i}{\hbar}f}\psi \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}f}\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}+\overrightarrow{g}-\overrightarrow{\nabla}f\right)e^{\frac{i}{\hbar}f}e^{-\frac{i}{\hbar}f}\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}+\overrightarrow{g}-\overrightarrow{\nabla}f\right)e^{\frac{i}{\hbar}f}\psi$$
$$= e^{-\frac{i}{\hbar}f}\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}+\overrightarrow{g}-\overrightarrow{\nabla}f\right)e^{\frac{i}{\hbar}f}\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}+\overrightarrow{g}\right)\psi$$

és bevezetve a $\overrightarrow{h} = \left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}+g\left(\overrightarrow{r}\right)\right)\psi$ jelölést, újra alkalmazhatjuk a korábban bizonyított azonosságot,

$$e^{-\frac{i}{\hbar}f}\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}+\overrightarrow{g}-\overrightarrow{\nabla}f\right)e^{\frac{i}{\hbar}f}\,\overrightarrow{h} = \left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}+\overrightarrow{g}\right)\overrightarrow{h} = \left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}+\overrightarrow{g}\right)^2\psi\,.$$

Ezt behelyettesítve a (370) egyenletbe és figyelembevéve az $f\left(\overrightarrow{r},t\right)$ és $\overrightarrow{g}\left(\overrightarrow{r},t\right)$ függvények definícióját, valóban a (365) Schrödinger egyenlethez jutunk.

5.7. Az Aharonov-Bohm effektus

Időben állandó mágneses tér esetén $\partial_t\Lambda\left(\overrightarrow{r},t\right)=0$, következésképpen $\phi'\left(\overrightarrow{r},t\right)=\phi\left(\overrightarrow{r},t\right)$. A vektorpotenciálra vonatkozó mértéktranszformáció kiintegrálásával kapjuk, hogy

$$\int_{\overrightarrow{r}_0}^{\overrightarrow{r}}\overrightarrow{A}'\left(\overrightarrow{s}\right)d\overrightarrow{s} = \int_{\overrightarrow{r}_0}^{\overrightarrow{r}}\overrightarrow{A}\left(\overrightarrow{s}\right)d\overrightarrow{s}+\Lambda\left(\overrightarrow{r}\right)-\Lambda\left(\overrightarrow{r}_0\right)\,. \tag{371}$$

Amennyiben a mágneses indukció mindenhol zérus, $\overrightarrow{B}'\left(\overrightarrow{r}\right)\equiv 0$, az $\overrightarrow{A}'\left(\overrightarrow{r}\right)$ vektorpotenciál is zérusnak választható, ami a fenti egyenlet alapján a

$$\Lambda\left(\overrightarrow{r}\right) = -\int_{\overrightarrow{r}_0}^{\overrightarrow{r}}\overrightarrow{A}\left(\overrightarrow{s}\right)d\overrightarrow{s}\,, \tag{372}$$

mértékfüggvénynek felel meg, ahol a $\Lambda\left(\overrightarrow{r}_0\right)=0$ értéket rögzítették. Nyilvánvaló, hogy a fenti konstrukció csak ott alkalmazható, ahol az $\overrightarrow{A}\left(\overrightarrow{r}\right)$ vektorpotenciál rotációmentes, azaz $\overrightarrow{B}\left(\overrightarrow{r}\right)=0$. Jelöljük ezt a tértartományt Ω_0-lal. Ez biztosítja ugyanis a $\Lambda\left(\overrightarrow{r}\right)$ mértékfüggvény egyértelműségét, tehát, hogy az integrál tetszőleges $\overrightarrow{r}_0\to\overrightarrow{r}$ útvonalra ugyanazt az értéket adja. Ezenfelül fel kell tennünk, hogy az Ω_0 tértartomány *egyszeresen összefüggő.* Ha ugyanis Ω_0 körbefog egy olyan Ω_B tértartományt, ahol $\overrightarrow{B}\neq 0$, akkor $\Lambda\left(\overrightarrow{r}\right)$ csak a körbeölelt fluxus,

$$\Phi_B = \oint\overrightarrow{A}\left(\overrightarrow{s}\right)d\overrightarrow{s} \tag{373}$$

egész-számszorosáig meghatározott.

Legyen $\overrightarrow{r}\in\Omega_0$ esetén a vektorpotenciál $\overrightarrow{A}\left(\overrightarrow{r}\right)$, a hullámfüggvényt pedig jelöljük $\psi_B\left(\overrightarrow{r},t\right)$-vel. Amennyiben a mágneses teret az Ω_0 tartományon kívül is kikapcsoljuk, a hullámfüggvény legyen $\psi_0\left(\overrightarrow{r},t\right)$. Ekkor a hullámfüggvények között fennáll a

$$\psi_0\left(\overrightarrow{r},t\right)=\psi_B\left(\overrightarrow{r},t\right)\exp\left(\frac{iq}{\hbar}\Lambda\left(\overrightarrow{r}\right)\right)=\psi_B\left(\overrightarrow{r},t\right)\exp\left(-\frac{iq}{\hbar}\int_{\overrightarrow{r}_0}^{\overrightarrow{r}}\overrightarrow{A}\left(\overrightarrow{s}\right)d\overrightarrow{s}\right)\,, \tag{374}$$

illetve a

$$\psi_B\left(\overrightarrow{r},t\right)=\psi_0\left(\overrightarrow{r},t\right)\exp\left(\frac{iq}{\hbar}\int_{\overrightarrow{r}_0}^{\overrightarrow{r}}\overrightarrow{A}\left(\overrightarrow{s}\right)d\overrightarrow{s}\right)\,. \tag{375}$$

összefüggés, ami arra utal, hogy a mágneses tér a vektorpotenciálon keresztül hat a hullámfüggvényre olyan tartományban is, ahol a mágneses tér zérus (Ω_0). Mivel a hatás a hullámfüggvényben egy fázisfaktorként jelentkezik, nem triviális tény, hogy kísérletileg kimutatható-e a mágneses tér jelenléte a részecske mozgásában (kvantumos viselkedésében).

Az AB kísérlet olyan kétréses elektron interferencia kísérlet, melyben a két rés közötti zárt térrészben, az elrendezésre merőleges irányú mágneses tér (szolenoid tekercs) van. Legyen $\overrightarrow{r}_0$ a forrás helye, $\overrightarrow{r}$ pedig az ernyő egy pontja. Az egzakt kvantummechanikai megoldás helyett az ernyőn kialakuló intenzitás leírására használjuk a rések szelektív letakarásával számítható hullámfüggvények, $\psi_1(\overrightarrow{r},t)$ és $\psi_2(\overrightarrow{r},t)$, interferenciáját. Ezt a – Jönsson-féle kétréses elektroninterferencia kísérlet magyarázatánál bevált – 'segédképet' azért érdemes használnunk, mert az egyes rések letakarásával kapott, $\overrightarrow{B}=0$ tértartományok egyszeresen összefüggőek lesznek (nem ölelik át a szolenoid fluxusát) és használható (375) egyenlet. Eszerint a két hullámfüggvény,

$$\psi_{1B}(\overrightarrow{r},t)=\psi_{10}(\overrightarrow{r},t)\exp\left(\frac{iq}{\hbar}\int_1\overrightarrow{A}(\overrightarrow{s})\,d\overrightarrow{s}\right) \tag{376}$$

és

$$\psi_{2B}(\overrightarrow{r},t)=\psi_{20}(\overrightarrow{r},t)\exp\left(\frac{iq}{\hbar}\int_2\overrightarrow{A}(\overrightarrow{s})\,d\overrightarrow{s}\right) \tag{377}$$

alakban írható, ahol ψ_{10} és ψ_{20} a hullámfüggvények, amikor a szolenoidban kikapcsoljuk a mágneses teret. A ernyőn ezen hullámfüggvények szuperpozíciójának abszolútérték négyzetével arányos intenzitás jelenik meg,

$$\begin{aligned}
|\psi_B(\overrightarrow{r},t)|^2 &= \frac{1}{2}|\psi_{1B}(\overrightarrow{r},t)+\psi_{2B}(\overrightarrow{r},t)|^2\\
&=\frac{1}{2}\left|\psi_{10}(\overrightarrow{r},t)\exp\left(\frac{iq}{\hbar}\left[\int_1\overrightarrow{A}(\overrightarrow{s})\,d\overrightarrow{s}-\int_2\overrightarrow{A}(\overrightarrow{s})\,d\overrightarrow{s}\right]\right)+\psi_{20}(\overrightarrow{r},t)\right|^2\\
&=\frac{1}{2}\left|\psi_{10}(\overrightarrow{r},t)\exp\left(\frac{iq}{\hbar}\oint\overrightarrow{A}(\overrightarrow{s})\,d\overrightarrow{s}\right)+\psi_{20}(\overrightarrow{r},t)\right|^2\\
&=\frac{1}{2}\left|\psi_{10}(\overrightarrow{r},t)\exp\left(\frac{iq}{\hbar}\Phi_B\right)+\psi_{20}(\overrightarrow{r},t)\right|^2 .
\end{aligned} \tag{378}$$

A hullámfüggvényekre szabad síkhullámokat feltételezve kvantitatív becslést is adhatunk az ernyőn megjelenő erősítési (vagy kioltási) vonaltávolságokra,

$$\begin{aligned}
I(r) &\sim \frac{1}{2}\left|\exp\left(ik\ell_1+\frac{iq}{\hbar}\Phi_B\right)+\exp(ik\ell_2)\right|^2\\
&=\frac{1}{2}\left|1+\exp\left(i\left[k\ell_1-k\ell_2+\frac{q}{\hbar}\Phi_B\right]\right)\right|^2\\
&=1+\cos\left(k\ell_1-k\ell_2+\frac{q}{\hbar}\Phi_B\right) ,
\end{aligned} \tag{379}$$

ahol ℓ_1 és ℓ_2 az 1-es és 2-es pályák hosszát jelölik. Az elekroninterferencia maximumainak (vagy minimumainak) egymáshoz viszonyított pozíciói megfelelnek annak, amikor

$$k(\ell_1-\ell_2)-\frac{e}{\hbar}\Phi_B=2\pi n\longrightarrow \ell_1-\ell_2=\lambda\left(n+\frac{\Phi_B}{h/e}\right)=\lambda\left(n+\frac{\Phi_B}{\Phi_0}\right) , \tag{380}$$

ahol $n\in Z$, $k=\frac{2\pi}{\lambda}$, $\lambda=\frac{h}{mv}$ a de Broglie hullámhossz és $\Phi_0=h/e=4.135\times10^{-11}\ \mathrm{T\,cm^2}$ az elemi fluxus. Az ernyőn kialakuló vonalak pozíciója tehát a szolenoid mágneses fluxusának változtatásával eltolódik, amit a kísérlet valóban igazolt.

Az Aharonov-Bohm effektus itt közölt magyarázata erősen kvalitatív jellegű. A kísérletben ugyanis mindkét rés nyitva van, tehát a hullámfüggvényt egy nem összefüggő tértartományban kell megkonstruálni. Teljesen nyilvánvalóvá válik ez a probléma akkor, amikor egy síkhullám szórását vizsgáljuk egy áramjárta szolenoid tekercsen. Az ernyőn kialakuló intenzitáskép hasonló függést mutat a Φ_B fluxustól, mint a kétréses interferencia kísérletben, viszont a (375) hullámfüggvény transzformáció nem alkalmazható. Sir Michael V. Berry és munkatársai megmutatták [M.V. Berry és mtsi., *Eur. J. Phys.* **1**, 154 (1980), M.V. Berry, *Eur. J. Phys.* **1**, 240 (1980)], hogy az Ω_0 tartományban megkonstruálható egy egyértékű (egzakt) szórási hullámfüggvény, melynek aszimptotikus alakja jól magyarázza a kísérleti megfigyelést.

Az egyszerűség kedvéért tekintsünk egy vonalszerű Φ_B mágneses fluxust. Hengerkoordinátákat (r, φ, z) használva a vektorpotenciál lehetséges reprezentációja,

$$A_\varphi = \frac{\Phi_B}{2\pi r} \; , \; A_r = A_z = 0 \; . \tag{381}$$

Másik egyszerűsítésünk az, hogy a töltött részecske mozgását csak egy a sugarú körpályán (igen vékony gyűrűben) engedjük meg, ezért a Hamilton operátort a

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{1}{a}\frac{\partial}{\partial\varphi} - qA_\varphi\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{iq}{h}\Phi_B\right)^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\frac{\Phi_B}{\Phi_0}\right)^2 \end{aligned} \tag{382}$$

alakban írhatjuk. A Schrödinger egyenlet triviális megoldása,

$$E = \frac{\hbar^2 C^2}{2ma^2} \tag{383}$$

$$\psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(i\left[C + \frac{\Phi_B}{\Phi_0}\right]\varphi\right) \tag{384}$$

ahol a *hullámfüggvény egyértékűségét* a

$$C + \frac{\Phi_B}{\Phi_0} = n \in Z \tag{385}$$

összefüggés biztosítja. A sajátállapot energiája tehát

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(n - \frac{\Phi_B}{\Phi_0}\right)^2 \; , \tag{386}$$

a hullámfüggvény pedig

$$\psi_n(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\varphi} \; . \tag{387}$$

Az eredményt úgy is interpretálhatjuk, hogy egy adott E energiához tartozó hullámfüggvényben,

$$\psi(E;\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(i\frac{\sqrt{2ma^2E}}{\hbar}\varphi\right) \exp\left(i\frac{\Phi_B}{\Phi_0}\varphi\right) \; , \tag{388}$$

expliciten megjelenik az AB effektusnál megismert mágneses fázisfaktor.

Az energia függését a Φ_B fluxustól megérthetjük a következő módon. A mágneses tér bekapcsolása Faraday indukciós törvénye alapján

$$E_r(t) = -\frac{1}{2\pi a}\frac{d\Phi_B(t)}{dt} \tag{389}$$

elektromos teret indukál, melynek következtében a töltött részecskére ható erő

$$F_r(t) = -\frac{q}{2\pi a}\frac{d\Phi_B(t)}{dt}\ , \tag{390}$$

az energia időbeli változása pedig

$$\begin{aligned}\frac{dE(t)}{dt} &= -\frac{1}{2m}p_r(t)\frac{dp_r(t)}{dt} = -\frac{q}{2\pi am}p_r(t)\frac{d\Phi_B(t)}{dt} \\ &= -\frac{q}{2\pi am}\sqrt{2mE(t)}\frac{d\Phi_B(t)}{dt} = -\frac{q}{\pi}\sqrt{\frac{E(t)}{2ma^2}}\frac{d\Phi_B(t)}{dt}\end{aligned} \tag{391}$$

amiből

$$\frac{dE}{d\Phi_B} = -\frac{q}{\pi}\left(\frac{E}{2ma^2}\right)^{1/2} \tag{392}$$

következik. Ez teljesen összhangban van a sajátállapotok energiájára kapott (386) kifejezéssel. (A fenti gondolatmenet E. Merzbacher, *Am. J. Phys.* **30**, 237 (1962) cikkéből származik.)

5.8. Fluxuskvantálás elsőfajú szupravezetőben

A Meissner-Ochsenfeld effektus következtében egy mágneses térbe tett elsőfajú szupravezetőből kiszorul a mágneses tér. Képzeljünk el egy szupravezető gyűrűt, mely belsejében a gyűrű síkjára merőleges mágneses tér van. Kísérletileg kimutatták [B. S. Deaver, Jr. és W. F. Fairbank, *Phys. Rev. Lett.* **7**, 43 (1961); R. Doll és M. Näbauer, *Phys. Rev. Lett.* **7**, 51 (1961)], hogy *a bezárt mágneses tér fluxusa kvantált.*

A jelenség megértéséhez az elsőfajú szupravezető sajátos tulajdonságait kell felhasználni. Mivel a szupravezető ideális diamágnes, belsejében a mágneses indukció értéke zérus. Stacionárius esetben, a

$$rot\,\vec{B} = \mu_0\left(\vec{j} + \varepsilon_0\frac{\partial\vec{E}}{\partial t}\right) \tag{393}$$

Maxwell egyenletből következik, hogy a szupravezető belsejében a $\vec{j}$ áramsűrűség zérus. (Az áram egy behatolási tartományban csak a szupravezető határán folyik.) Belátható, hogy szupravezető állapotban a töltéssűrűség térben is homogén, azaz a szupravezető állapot hullámfüggvénye a

$$\psi(\vec{r}) = \sqrt{\varrho}e^{i\vartheta(\vec{r})} \tag{394}$$

alakban vehető fel, ahol ϱ a szupravezető részecskék sűrűsége és $\vartheta(\vec{r})$ a szupravezető állapot fázisa. Az áramsűrűség kifejezése ekkor,

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{\hbar q}{m}\left(\vec{\nabla}\vartheta(\vec{r}) - \frac{q}{\hbar}\vec{A}(\vec{r})\right)\varrho \tag{395}$$

és $\vec{j} = 0$ miatt fennáll, hogy

$$\vec{\nabla}\vartheta(\vec{r}) = \frac{q}{\hbar}\vec{A}(\vec{r})\ . \tag{396}$$

Most ki kell használnunk a hullámfüggvény egyértékűségét, azaz, hogy körbejárás esetén a fázis változása legfeljebb 2π egészszámú többszöröse lehet:

$$\Delta\vartheta = \oint \overrightarrow{\nabla}\vartheta\left(\overrightarrow{s}\right)d\overrightarrow{s} = \frac{q}{\hbar}\oint \overrightarrow{A}\left(\overrightarrow{r}\right)d\overrightarrow{s} = \frac{q}{\hbar}\Phi_B = 2\pi n \tag{397}$$

azaz

$$\Phi_B = \frac{h}{q}n\,. \tag{398}$$

Mivel a szupravezető közeg $q = -2e$ töltésű Cooper párok kondenzátuma, az elsőfajú szupravezető gyűrű által bezárt mágneses fluxus $\Phi_0/2$ egészszámú többszöröse lehet.

5.9. Szabad elektronok mozgása homogén mágneses térben: Landau nívók

A *klasszikus elektrodinamika* szerint a z irányú homogén mágneses térben, a térre merőleges síkban egy töltött részecske

$$\omega_c = \frac{|q|\,B}{m} \tag{399}$$

körfrekvenciájú körmozgást végez. Mivel ekkor a rendszer energiája

$$E = \frac{1}{2}mR^2\omega_c^2\,, \tag{400}$$

a *Bohr-Sommerfeld kvantál*ási feltétel alapján,

$$\oint L_z d\varphi = 2\pi mRv = 2\pi mR^2\omega_c = hn \;\Rightarrow\; mR^2\omega_c = n\hbar \;\Rightarrow\; E_n = \frac{1}{2}n\hbar\omega_c\,, \tag{401}$$

megsejthető, hogy a *kvantummechanikai tárgyalás* a síkbeli mozgás következtében kvantált energianívókat eredményez.

Vegyük fel koordinátarendszerünk z tengelyét $\overrightarrow{B}$ irányában: $\overrightarrow{B} = (0,0,B)$. *Szimmetrikus mérték*et használva a vektorpotenciál

$$\overrightarrow{A} = \left(-\frac{1}{2}By, \frac{1}{2}Bx, 0\right)\,, \tag{402}$$

a kinetikus impulzus pedig

$$\overrightarrow{K} = (K_x, K_y, K_z) = \left(p_x - \frac{eB}{2}y,\; p_y + \frac{eB}{2}x,\; p_z\right) \tag{403}$$

$$= \left(p_x - \frac{m\omega_c}{2}y,\; p_y + \frac{m\omega_c}{2}x,\; p_z\right) \tag{404}$$

alakú (elektronra $q = -e$!) és fennáll a

$$[K_x, K_y] = \frac{\hbar e}{i}B = \frac{\hbar}{i}m\omega_c \tag{405}$$

csererereláció. A

$$H = \frac{1}{2m}\left(K_x^2 + K_y^2\right) + \frac{p_z^2}{2m} \tag{406}$$

Hamilton operátor sajátfüggvényei,

$$H\psi = E\psi\,, \tag{407}$$

$$\psi\left(\overrightarrow{r}\right) = \varphi_k\left(x,y\right)\,e^{ikz} \tag{408}$$

alakban írhatók, ahol $k \in R$ és a $\varphi_k(x,y)$ függvény teljesíti az

$$\frac{1}{2m}\left(K_x^2+K_y^2\right)\varphi_k(x,y)=\left(E-\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)\varphi_k(x,y) \tag{409}$$

sajátértékegyenletet. Bevezetve az

$$X=\frac{K_yc}{eB}=\frac{K_y}{m\omega_c} \quad \text{és} \quad P=K_x \tag{410}$$

operátorokat, a (405) csererelációból egyrészt következik, hogy

$$[P,X]=\frac{\hbar}{i}\,, \tag{411}$$

másrészt pedig (409) a

$$\left(\frac{P^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega_c^2X^2\right)\varphi_k(x,y)=\left(E-\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)\varphi_k(x,y) \tag{412}$$

oszcillátor egyenletbe megy át. A tanult *algebrai megoldás* alapján bevezethetjük az

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{m\omega_c}{2\hbar}}\left(X+\frac{i}{m\omega_c}P\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}L_H}\frac{1}{m\omega_c}\left(K_x+iK_y\right) \end{aligned} \tag{413}$$

és

$$\begin{aligned} a^+ &= \sqrt{\frac{m\omega_c}{2\hbar}}\left(X-\frac{i}{m\omega_c}P\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}L_H}\frac{1}{m\omega_c}\left(K_x-iK_y\right) \end{aligned} \tag{414}$$

léptetőoperátorokat, ahol

$$L_H=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_c}}=\sqrt{\frac{\hbar}{eB}} \tag{415}$$

Behelyettesítve a $\hbar$ és e értékeit,

$$L_H=\frac{25.66}{\sqrt{B\,[T]}}\text{nm}$$

adódik, ahol a mágneses indukciót teslában mérjük. Szokványos terek esetén a karakterisztikus (mágneses) hossz több nagyságrenddel nagyobb az atomi távolságoknál. A Hamilton-operátor nyilvánvalóan

$$H=\frac{1}{2}m\omega_c^2X^2+\frac{P^2}{2m}+\frac{p_z^2}{2m}=\hbar\omega_c\left(a^+a+\frac{1}{2}\right)+\frac{p_z^2}{2m} \tag{416}$$

alakot ölti. Következésképpen a sajátenergiák,

$$E=E_{n,k}=\hbar\omega_c\left(n+\frac{1}{2}\right)+\frac{\hbar^2k^2}{2m}\,, \tag{417}$$

ahol az $n=0,1,2,\ldots$ index az ún. *Landau-nívóka*t jelölik.

A kvantummechanikai probléma megoldható az *aszimetrikus (ún. Landau-) mérték*ben

$$\overrightarrow{A} = (-By, 0, 0)\,, \tag{418}$$

$$\psi_{n,k_x,k_z}(x,y,z) \sim \exp(ik_z z)\exp(ik_x x)\exp\left(-\frac{1}{2L_H^2}\left(y - k_x L_H^2\right)^2\right) H_n\left(\frac{y - k_x L_H^2}{L_H}\right)\,, \tag{419}$$

ahol H_n Hermite polinom. Innen is látható, hogy a hullámfüggvény karakterisztikus y irányú kiterjedése L_H.

Mivel az energia nem függ a k_x kvantumszámtól, a *Landau nívók elfajultak*. (Szimmetrikus mértékben, az algebrai levezetésből ez úgy látszik, hogy az x, y, p_x és p_y operátorokból konstruálhatók a részecske tömegközéppontjának helyével és sebességével kapcsolatos b és b^+ léptetőoperátorok, melyek kommutálnak az a és a^+ operátorokkal, így H-val is. Ezért ezek a léptetőoperátorok egy Landau nívón belüli állapotok között léptetnek.) Ha a rendszer véges (L_x, L_y) kiterjedésű, akkor

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x}m \qquad (m \in N) \tag{420}$$

és mivel y irányban a Landau pályák $k_x L_H^2$ távolságban helyezkednek el egymástól, fennáll az

$$L_H^2 \underbrace{\frac{2\pi}{L_x}M}_{\max k_x} = L_y \longrightarrow M = \frac{L_x L_y}{2\pi L_H^2} = \frac{A\,|q|\,B}{h} = \frac{\Phi}{\Phi_0} \tag{421}$$

összefüggés, ahol M egy Landau nívó degeneráltsága, A a minta felülete és Φ a mágneses indukció fluxusa. Ezt úgy is megfogalmazhatjuk, hogy egy Landau pálya egy elemi fluxust képvisel és a mintában kialakuló Landau pályák száma (Landau nívók degeneráltsága) a fluxussal egyenes arányban nő. Ha kváziklasszikus közelítésben egy Landau állapotot egy L_H sugarú körön történő mozgásnak feleltetünk meg, és figyelembe vesszük az állapotfüggvény kiszélesedését ($r \simeq \sqrt{2}L_H$), úgy az egy állapot felületére vett fluxus:

$$\Phi = 2\pi L_H^2 B = \frac{hB}{m\omega_c} = \frac{h}{e} = \Phi_0 \quad ! \tag{422}$$

Függelékek

6. Variációs elv

Egy hermitikus Hamilton operátor normált sajátvektorait megkaphatjuk az

$$E[\psi] = \langle\psi|H\psi\rangle \tag{423}$$

energiafunkcionál

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \tag{424}$$

feltétel melletti szélsőértékének (minimumának) keresésével. Ehhez érdemes bevezetni az

$$F[\psi] = \langle\psi|H\psi\rangle - \varepsilon\langle\psi|\psi\rangle \tag{425}$$

funkcionált, ahol ε egy Lagnrange multiplikátor. Számítsuk ki a funkcionált $|\psi\rangle + |\delta\psi\rangle$ argumentummal:

$$\begin{aligned} F[\psi+\delta\psi] &\simeq \langle\psi|H\psi\rangle + \langle\delta\psi|H\psi\rangle + \langle\psi|H\delta\psi\rangle - \varepsilon\langle\delta\psi|\psi\rangle - \varepsilon\langle\psi|\delta\psi\rangle \\ &= F[\psi] + \langle\delta\psi|(H-\varepsilon)\psi\rangle + \langle\psi|(H-\varepsilon)\delta\psi\rangle \\ &= F[\psi] + \langle\delta\psi|(H-\varepsilon)\psi\rangle + \langle(H-\varepsilon)\psi|\delta\psi\rangle \end{aligned} \tag{426}$$

ahol a $|\delta\psi\rangle$-ben másodrendű tagokat elhanyagoltuk. Így $F[\psi]$ variációja:

$$\begin{aligned} \delta F[\psi,\delta\psi] &= F[\psi+\delta\psi] - F[\psi] \\ &= \langle\delta\psi|(H-\varepsilon)\psi\rangle + \langle(H-\varepsilon)\psi|\delta\psi\rangle = 2\,\mathrm{Re}\langle\delta\psi|(H-\varepsilon)\psi\rangle\,. \end{aligned} \tag{427}$$

Képezzük a variációt $|\psi\rangle + i|\delta\psi\rangle$ esetén:

$$\begin{aligned} \delta F[\psi,i\delta\psi] &= \langle i\delta\psi|(H-\varepsilon)\psi\rangle + \langle(H-\varepsilon)\psi|i\delta\psi\rangle \\ &= -i\left(\langle\delta\psi|(H-\varepsilon)\psi\rangle - \langle(H-\varepsilon)\psi|\delta\psi\rangle\right) = 2\,\mathrm{Im}\langle\delta\psi|(H-\varepsilon)\psi\rangle\,. \end{aligned} \tag{428}$$

Legyen $|\psi\rangle$ olyan vektor, melynek tetszőleges kicsiny megváltozása esetén $F[\psi]$ megváltozása zérus, azaz $F[\psi]$ stacionárius:

$$\delta F[\psi] = 0 \tag{429}$$

amiből a fentiek alapján

$$\langle\delta\psi|(H-\varepsilon)\psi\rangle = 0 \iff (H-\varepsilon)\psi = 0 \tag{430}$$

következik.

Megjegyzés: A fenti eredmény közvetlenül úgy is megkapjhatjuk, hogy az $F[\psi]$ funkcionált függetlenül variáljuk $\langle\psi| + \langle\delta\psi|$ szerint, miközben a $|\psi\rangle$ vektort fixen tartjuk.

7. Hartree-Fock módszer

Z rendszámú, N elektronos atom Hamilton operátora

$$H = \sum_{i=1}^{N} H_0 (\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^{N} V (\vec{r}_i, \vec{r}_j) \tag{431}$$

$$H_0 (\vec{r}_i) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - \frac{kZe^2}{r_i} \tag{432}$$

$$V (\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \frac{ke^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{433}$$

Slater determináns hullámfüggvény:

$$\psi (1, 2, \ldots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P(1,\ldots,N)} (-1)^P P(1, \ldots, N) \varphi_{i_1} (1) \varphi_{i_2} (2) \ldots \varphi_{i_N} (N) \tag{434}$$

$$= A \varphi_{i_1} (1) \varphi_{i_2} (2) \ldots \varphi_{i_N} (N) \tag{435}$$

ahol

$$A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P(1,\ldots,N)} (-1)^P P(1, \ldots, N) \tag{436}$$

az antiszimmetrizáló operátor és a φ_i egyrészecske függvények ortonormáltak:

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij} \; . \tag{437}$$

A rendszer energiáját meghatározó funkcionál a normálási feltétel figyelembevételével

$$F (\{\varphi_i\}) = \langle \psi | H | \psi \rangle - \sum_{i,j} \varepsilon_{ij} \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle \tag{438}$$

ahol $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$, ami biztosítja, hogy $F (\{\varphi_i\})$ valós értékű legyen.

A Hamilton-operátor várhatóértékének kiszámítása:

$$\langle \psi | H \psi \rangle = \langle A \varphi_{i_1} (1) \varphi_{i_2} (2) \ldots \varphi_{i_N} (N) \, | H A \varphi_{i_1} (1) \varphi_{i_2} (2) \ldots \varphi_{i_N} (N) \rangle \tag{439}$$

$$= \langle \varphi_{i_1} (1) \varphi_{i_2} (2) \ldots \varphi_{i_N} (N) \, | A H A \varphi_{i_1} (1) \varphi_{i_2} (2) \ldots \varphi_{i_N} (N) \rangle \tag{440}$$

mivel az A operátor önadjungált.

Nézzük meg $N = 2$-re:

$$\begin{aligned}
&\langle \varphi_3 (1) \varphi_4 (2) \, | \, \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1 (1) \varphi_2 (2) - \varphi_1 (2) \varphi_2 (1)) \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \varphi_3 (1) \varphi_4 (2) \, | \, \varphi_1 (1) \varphi_2 (2) \rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \varphi_3 (1) \varphi_4 (2) \, | \, \varphi_1 (2) \varphi_2 (1) \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \varphi_3 (1) \varphi_4 (2) \, | \, \varphi_1 (1) \varphi_2 (2) \rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \varphi_3 (2) \varphi_4 (1) \, | \, \varphi_1 (1) \varphi_2 (2) \rangle \\
&= \langle \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_3 (1) \varphi_4 (2) - \varphi_3 (2) \varphi_4 (1)) \, | \, \varphi_1 (1) \varphi_2 (2) \rangle
\end{aligned}$$

$\sum_i H_0(i)$ várhatóértékének számítása:

$$[H_0(1)+H_0(2)]\,A\,\varphi_1(1)\,\varphi_2(2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left([H_0(1)\,\varphi_1(1)]\,\varphi_2(2) - \varphi_1(2)\,[H_0(1)\,\varphi_2(1)]\right) + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_1(1)\,[H_0(2)\,\varphi_2(2)] - [H_0(2)\,\varphi_1(2)]\,\varphi_2(1)\right)$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\sqrt{2}}A\,[H_0(1)\,\varphi_1(1)]\,\varphi_2(2) &= \frac{1}{2}\left([H_0(1)\,\varphi_1(1)]\,\varphi_2(2) - [H_0(2)\,\varphi_1(2)]\,\varphi_2(1)\right)\\
-\frac{1}{\sqrt{2}}A\,\varphi_1(2)\,[H_0(1)\,\varphi_2(1)] &= \frac{1}{2}\left(-\varphi_1(2)\,[H_0(1)\,\varphi_2(1)] + \varphi_1(1)\,[H_0(2)\,\varphi_2(2)]\right)\\
\frac{1}{\sqrt{2}}A\,\varphi_1(1)\,[H_0(2)\,\varphi_2(2)] &= \frac{1}{2}\left(\varphi_1(1)\,[H_0(2)\,\varphi_2(2)] - \varphi_1(2)\,[H_0(1)\,\varphi_2(1)]\right)\\
-\frac{1}{\sqrt{2}}A\,[H_0(2)\,\varphi_1(2)]\,\varphi_2(1) &= \frac{1}{2}\left(-[H_0(2)\,\varphi_1(2)]\,\varphi_2(1) + [H_0(1)\,\varphi_1(1)]\,\varphi_2(2)\right)
\end{aligned}$$

$$A\,[H_0(1)+H_0(2)]\,A\,\varphi_1(1)\,\varphi_2(2) = [H_0(1)\,\varphi_1(1)]\,\varphi_2(2) - [H_0(2)\,\varphi_1(2)]\,\varphi_2(1) + \varphi_1(1)\,[H_0(2)\,\varphi_2(2)] - \varphi_1(2)\,[H_0(1)\,\varphi_2(1)]$$

$$\langle\varphi_1(1)\,\varphi_2(2)\,|A\,[H_0(1)+H_0(2)]\,A\,\varphi_1(1)\,\varphi_2(2)\rangle = \langle\varphi_1(1)\,|H_0(1)\,\varphi_1(1)\rangle + \langle\varphi_2(2)\,|H_0(2)\,\varphi_2(2)\rangle$$

Általánosítás tetszőleges N-re:

$$\langle A\varphi_{i_1}(1)\,\varphi_{i_2}(2)\ldots\varphi_{i_N}(N)\,|\sum_{i=1}^{N} H_0(i)\,A\,\varphi_{i_1}(1)\,\varphi_{i_2}(2)\ldots\varphi_{i_N}(N)\rangle = \sum_{k=1}^{N}\langle\varphi_{i_k}(1)\,|H_0(1)\,\varphi_{i_k}(1)\rangle \tag{441}$$

$\frac{1}{2}\sum_{i\neq j} V(i,j)$ várhatóértékének számítása:

$$V(1,2)\,A\,\varphi_1(1)\,\varphi_2(2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(V(1,2)\,\varphi_1(1)\,\varphi_2(2) - V(2,1)\,\varphi_1(2)\,\varphi_2(1)\right)$$

$$\begin{aligned}
A\,V(1,2)\,A\,\varphi_1(1)\,\varphi_2(2) &= \frac{1}{2}\{V(1,2)\,\varphi_1(1)\,\varphi_2(2) - V(2,1)\,\varphi_1(2)\,\varphi_2(1)\\
&\quad - V(2,1)\,\varphi_1(2)\,\varphi_2(1) + V(1,2)\,\varphi_1(1)\,\varphi_2(2)\}\\
&= V(1,2)\,\varphi_1(1)\,\varphi_2(2) - V(2,1)\,\varphi_1(2)\,\varphi_2(1)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle\varphi_1(1)\,\varphi_2(2)\,|A\,V(1,2)\,A\,\varphi_1(1)\,\varphi_2(2)\rangle &= \langle\varphi_1(1)\,\varphi_2(2)\,|V(1,2)\,\varphi_1(1)\,\varphi_2(2)\rangle\\
&\quad -\langle\varphi_1(1)\,\varphi_2(2)\,|V(2,1)\,\varphi_1(2)\,\varphi_2(1)\rangle
\end{aligned}$$

Általánosítás tetszőleges N-re:

$$\begin{aligned}
&\langle A\varphi_{i_1}(1)\,\varphi_{i_2}(2)\ldots\varphi_{i_N}(N)\,|\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j=1\\(i\neq j)}}^{N} V(i,j)\,A\,\varphi_{i_1}(1)\,\varphi_{i_2}(2)\ldots\varphi_{i_N}(N)\rangle\\
&=\frac{1}{2}\sum_{k,l=1}^{N}\langle\varphi_{i_k}(1)\,\varphi_{i_l}(2)\,|V(1,2)\,\varphi_{i_k}(1)\,\varphi_{i_l}(2)\rangle - \frac{1}{2}\sum_{k,l=1}^{N}\langle\varphi_{i_k}(1)\,\varphi_{i_l}(2)\,|V(1,2)\,\varphi_{i_k}(2)\,\varphi_{i_l}(1)\rangle
\end{aligned} \tag{442}$$

Tehát a Hamilton-operátor várhatóértéke:

$$\langle\psi|H\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N}\langle\varphi_i(1)\,|H_0(1)\,\varphi_i(1)\rangle + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N}\langle\varphi_i(1)\,\varphi_j(2)\,|V(1,2)\,\varphi_i(1)\,\varphi_j(2)\rangle$$
$$-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N}\langle\varphi_i(1)\,\varphi_j(2)\,|V(1,2)\,\varphi_j(2)\,\varphi_i(1)\rangle \tag{443}$$

ahol az egyszerűség kedvéért az egyelektron hullámfüggvényeket az $i = 1, \ldots, N$ indexekkel jelöltük, ami most már nem keverhető össze az elektronok indexelésével, mert csupán egy- és két-elektron tagok szerepelnek a kifejezésben. Vegyük észre, hogy a fenti egyenlet jobboldalának második és harmadik tagjában az összegzésben az $i = j$ tag kiejtik egymást, így az $F(\{\varphi_i\})$ funkcionál a

$$F(\{\varphi_i\}) = \sum_{i=1}^{N}\langle\varphi_i(1)\,|H_0(1)\,\varphi_i(1)\rangle + \frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j=1\\(i\neq j)}}^{N}\langle\varphi_i(1)\,\varphi_j(2)\,|V(1,2)\,\varphi_i(1)\,\varphi_j(2)\rangle$$
$$-\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j=1\\(i\neq j)}}^{N}\langle\varphi_i(1)\,\varphi_j(2)\,|V(1,2)\,\varphi_j(2)\,\varphi_i(1)\rangle - \sum_{i,j}\varepsilon_{ij}\,\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle \tag{444}$$

alakban írható. Variáljuk ezt a kifejezést $\langle\varphi_k|$ szerint:

$$\delta_{(k)}F(\{\varphi_i\}) = \langle\delta\varphi_k|H_0\varphi_k\rangle + \sum_{\substack{i=1\\(i\neq k)}}^{N}\langle\delta\varphi_k(1)\,\varphi_i(2)\,|V(1,2)\,\varphi_k(1)\,\varphi_i(2)\rangle$$
$$-\sum_{\substack{i=1\\(i\neq k)}}^{N}\langle\delta\varphi_k(1)\,\varphi_i(2)\,|V(1,2)\,\varphi_k(2)\,\varphi_i(1)\rangle - \sum_{i=1}^{N}\varepsilon_{ki}\,\langle\delta\varphi_k|\varphi_i\rangle \tag{445}$$

melyet felírhatunk az alábbi módon

$$\delta_{(k)}F(\{\varphi_i\}) = \langle\delta\varphi_k|\frac{\delta F(\{\varphi_i\})}{\delta\langle\varphi_k|}\rangle \tag{446}$$

ahol $\frac{\delta F(\{\varphi_i\})}{\delta\langle\varphi_k|}$ az $F(\{\varphi_i\})$ funkcionálderiváltja:

$$\frac{\delta F(\{\varphi_i\})}{\delta\langle\varphi_k|} = H_0\varphi_k + \sum_{\substack{i=1\\(i\neq k)}}^{N}\langle\varphi_i(2)\,|V(1,2)\,\varphi_i(2)\rangle\,\varphi_k - \sum_{\substack{i=1\\(i\neq k)}}^{N}\langle\varphi_i(2)\,|V(1,2)\,\varphi_k(2)\rangle\,\varphi_i - \sum_{i=1}^{N}\varepsilon_{ki}\varphi_i \tag{447}$$

melynek eltűnését követeljük meg a bevezetett variációs elv szellemében. A ψ többelektronos Slater determináns hullámfüggvényt egy unitér transzformáció nyilvánvalóan változatlanul hagyja. Válasszuk azt a transzformációt, amely az ε_{ki} szimmetrikus mátrixot diagonalizálja. A sajátértékeket ε_k-val jelölve, valamint a sajátvektorok által meghatározott unitér transzformációt az φ_i bázisra alkalmazva kapjuk a *kanonikus Hartree-Fock egyenleteket*:

$$H_0\varphi_k + \sum_{\substack{i=1\\(i\neq k)}}^{N}\langle\varphi_i(2)\,|V(1,2)\,\varphi_i(2)\rangle\,\varphi_k - \sum_{\substack{i=1\\(i\neq k)}}^{N}\langle\varphi_i(2)\,|V(1,2)\,\varphi_k(2)\rangle\,\varphi_i = \varepsilon_k\varphi_k \tag{448}$$

Az egyelektron hullámfüggvényeket $\varphi_i(1) = \varphi_i(\overrightarrow{r})\,\chi_{m_{s_i}}$ alakban felvéve és kihasználva, hogy $H_0(1)$ és $V(1,2)$ nem tartalmaznak spin-operátorokat (spin-függetlenek):

$$\langle \varphi_i(2)\,|V(1,2)\,\varphi_i(2)\rangle = \int d^3r_2\,\varphi_i(\overrightarrow{r}_2)^* \frac{ke^2}{|\overrightarrow{r}_1 - \overrightarrow{r}_2|}\varphi_i(\overrightarrow{r}_2) \tag{449}$$

és

$$\langle \varphi_i(2)\,|V(1,2)\,\varphi_k(2)\rangle = \delta_{m_{s_i}m_{s_k}}\int d^3r'\,\varphi_i(\overrightarrow{r}_2)^* \frac{ke^2}{|\overrightarrow{r}_1 - \overrightarrow{r}_2|}\varphi_k(\overrightarrow{r}_2)\ . \tag{450}$$

(Megjegyezzük, hogy, ha $m_{s_i} \neq m_{sj}$, $\varphi_i(\overrightarrow{r}) = \varphi_j(\overrightarrow{r})$ megengedett.)

Bevezetve az ún. Hartree-potenciált,

$$V^H(\overrightarrow{r}) = \sum_{\substack{i=1\\(i\neq k)}}^{N}\int d^3r'\varphi_i(\overrightarrow{r}')^* \frac{ke^2}{|\overrightarrow{r} - \overrightarrow{r}'|}\varphi_i(\overrightarrow{r}') \tag{451}$$

és a nemlokális kicserélődési potenciált,

$$V^x(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{r}') = -\sum_{\substack{i=1\\(i\neq k)}}^{N}\delta_{m_{s_i}m_{s_k}}\,\varphi_i(\overrightarrow{r}')^* \frac{ke^2}{|\overrightarrow{r} - \overrightarrow{r}'|}\varphi_k(\overrightarrow{r})\ ,$$

a HF egyenletek koordináta-reprezentációban a

$$\big(H_0(\overrightarrow{r}) + V^H(\overrightarrow{r})\big)\,\varphi_k(\overrightarrow{r}) + \int d^3r'V^x(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{r}')\,\varphi_k(\overrightarrow{r}') = \varepsilon_k\varphi_k(\overrightarrow{r}) \qquad (k = 1, 2, \ldots, N) \tag{452}$$

alakban írhatók, melyeket önkonzisztens módon, iterálva lehet megoldani.

Nézzük meg az ε_k Lagrange paraméterek jelentését. A HF egyenleteket $\varphi_k(\overrightarrow{r})^*$-gal beszorozva és kiintegrálva kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}\varepsilon_k = \int d^3r\,\varphi_k(\overrightarrow{r})^*\,H_0(\overrightarrow{r})\,\varphi_k(\overrightarrow{r}) &+ \int\!\!\int d^3r\,\varphi_k(\overrightarrow{r})^*\,V^H(\overrightarrow{r})\,\varphi_k(\overrightarrow{r}) \\ &+ \int d^3r\int d^3r'\varphi_k(\overrightarrow{r})^*\,V_k^x(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{r}')\,\varphi_k(\overrightarrow{r}')\ ,\end{aligned} \tag{453}$$

vagy

$$\begin{aligned}\varepsilon_k = \int d^3r\,\varphi_k(\overrightarrow{r})^*\,H_0(\overrightarrow{r})\,\varphi_k(\overrightarrow{r}) &+ \sum_{i(\neq k)}\int\!\!\int d^3r\,\varphi_k(\overrightarrow{r})^*\,\varphi_i(\overrightarrow{r}')^* \frac{ke^2}{|\overrightarrow{r} - \overrightarrow{r}'|}\varphi_k(\overrightarrow{r})\,\varphi_i(\overrightarrow{r}') \\ &- \sum_{i(\neq k)}\int d^3r\int d^3r'\varphi_k(\overrightarrow{r})^*\,\varphi_i(\overrightarrow{r}')\,\frac{ke^2}{|\overrightarrow{r} - \overrightarrow{r}'|}\varphi_k(\overrightarrow{r}')\ \varphi_i(\overrightarrow{r}),\end{aligned} \tag{454}$$

ami az $E = \langle\psi|H\psi\rangle$ kifejezésben azon tagok összessége, melyekben a φ_k egyrészecske állapot előfordul. Így ha az N-elektron rendszerből a φ_k állapotban lévő elektront eltávolítjuk (és a többi egyelektron állapotot változatlanul hagyjuk), akkor a rendszer energiája ε_k-val csökken, azaz az ionizációs energia $-\varepsilon_k$.

Az egyrészecske energiákat felösszegezve a következő összefüggéshez jutunk:

$$\sum_{k=1}^{N}\varepsilon_k = \langle\psi|H\psi\rangle + E_H + E_x \tag{455}$$

ahol az elektrosztatikus (Hartree) energia

$$
\begin{aligned}
E_H &= \frac{1}{2}\sum_k \int\int d^3r\,\varphi_k\left(\vec{r}\right)^* V^H\left(\vec{r}\right)\varphi_k\left(\vec{r}\right) \qquad (456)\\
&= \frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j\\(i\neq j)}} \int\int d^3r' d^3r\,\varphi_i\left(\vec{r}\right)^*\varphi_j\left(\vec{r}'\right)^* \frac{ke^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\varphi_i\left(\vec{r}\right)\varphi_j\left(\vec{r}'\right)
\end{aligned}
$$

és a kicserélődési energia

$$
\begin{aligned}
E_x &= \frac{1}{2}\sum_k \int d^3r \int d^3r'\varphi_k\left(\vec{r}\right)^* V_k^x\left(\vec{r},\vec{r}'\right)\varphi_k\left(\vec{r}'\right)\\
&= -\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j\\(i\neq j)}} \int d^3r \int d^3r'\varphi_i\left(\vec{r}\right)^*\varphi_j\left(\vec{r}'\right)^* \frac{ke^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\varphi_i\left(\vec{r}'\right)\varphi_j\left(\vec{r}'\right)\ . \qquad (457)
\end{aligned}
$$

A kölcsönható rendszer energiáját tehát megkapjuk, ha az egyrészecske energiák összegéből levonjuk a kölcsönhatási és kicserélődési energia önkonzisztens megoldásokkal vett értékét (double-counting járulékok). Ez az eredmény nagyfokú hasonlóságot mutat pl. a spin-modelleknél alkalmazott átlagtér közelítéshez, így a Hartree-Fock módszert nevezhetjük a kölcsönható elektronrendszer átlagtér közelítésének.

8. Adiabatikus időfejlődés

A Hamilton operátor paraméteres időfüggése a Schrödinger képben:

$$H\left(t\right)=H\left(R\left(t\right)\right) \tag{458}$$

ahol R egy többdimenziós valós paramétertér eleme.

Paraméteres sajátállapotok és sajátenergiák:

$$H\left(R\right)\varphi_m\left(R\right)=E_m\left(R\right)\varphi_m\left(R\right) \tag{459}$$

$$\left\langle \varphi_n\left(R\right)|\varphi_m\left(R\right)\right\rangle=\delta_{nm} \tag{460}$$

A sajátállapot paraméteres időfüggése:

$$\varphi_n\left(t\right)\equiv\varphi_n\left(R\left(t\right)\right) \tag{461}$$

$$\dot{\varphi}_n\left(t\right)\equiv\dot{R}\left(t\right)\,\nabla_R\varphi_n\left(R\right) \tag{462}$$

$$\left\langle \varphi_n\left(t\right)|\dot{\varphi}_m\left(t\right)\right\rangle+\left\langle \dot{\varphi}_n\left(t\right)|\varphi_m\left(t\right)\right\rangle=\left\langle \varphi_n\left(t\right)|\dot{\varphi}_m\left(t\right)\right\rangle+\left\langle \varphi_m\left(t\right)|\dot{\varphi}_n\left(t\right)\right\rangle^*=0 \tag{463}$$

$$\mathrm{Re}\left\langle \varphi_n\left(t\right)|\dot{\varphi}_n\left(t\right)\right\rangle=0 \tag{464}$$

azaz $\left\langle \varphi_n\left(R\right)|\nabla_R\varphi_n\left(R\right)\right\rangle$ tisztán imaginárius mennyiség.

A hullámfüggvény időfüggése:

$$i\hbar\partial_t\psi\left(t\right)=H\left(t\right)\psi\left(t\right) \tag{465}$$

Kifejtés a paraméteres megoldások szerint:

$$\psi\left(t\right)=\sum_m c_m\left(t\right)\varphi_m\left(t\right) \tag{466}$$

A kifejtést behelyettesítve a Schrödinger egyenletbe:

$$i\hbar\sum_m\left(\dot{c}_m\left(t\right)\varphi_m\left(t\right)+c_m\left(t\right)\dot{\varphi}_m\left(t\right)\right)=\sum_m E_m\left(t\right)c_m\left(t\right)\varphi_m\left(t\right) \tag{467}$$

$$\Downarrow$$

$$\dot{c}_n\left(t\right)+\frac{i}{\hbar}E_n\left(t\right)c_n\left(t\right)+\sum_m c_m\left(t\right)\left\langle \varphi_n\left(t\right)|\dot{\varphi}_m\left(t\right)\right\rangle=0 \tag{468}$$

Kezdeti feltétel:

$$\psi\left(t_0\right)=\varphi_k\left(t_0\right)\Longrightarrow c_n\left(t_0\right)=\delta_{nk} \tag{469}$$

Adiabatikus megoldás: nincs átmenet másik sajátállapotba

$$c_n^{ad}\left(t\right)=\delta_{nk}\,c_k\left(t\right),\ c_k\left(t_0\right)=1$$

$$\Downarrow$$

$$\dot{c}_k(t) + \left(\frac{i}{\hbar}E_k(t) + \langle \varphi_k(t) | \dot{\varphi}_k(t)\rangle\right) c_k(t) = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{d}{dt}\ln c_k(t) = -\frac{i}{\hbar}E_k(t) - \langle \varphi_k(t) | \dot{\varphi}_k(t)\rangle \tag{470}$$

$$\Downarrow$$

$$c_k(t) = e^{-id_k(t)}e^{i\gamma_k(t)} \tag{471}$$

ahol $d_k(t)$ a *dinamikus fázis*

$$d_k(t) = \frac{1}{\hbar}\int_{t_0}^{t} E_k(t')\,dt' \tag{472}$$

és $\gamma_k(t)$ a *geometriai fázis*

$$\gamma_k(t) = i\int_{t_0}^{t} \langle \varphi_k(t') | \dot{\varphi}_k(t')\rangle\,dt' \tag{473}$$

$$\Downarrow$$

$$\underline{\psi^{ad}(t) = e^{-id_k(t)}e^{i\gamma_k(t)}\varphi_k(t)} \tag{474}$$

A hullámfüggvény tehát csupán egy fázisfaktorban különbözik a 'pillanatnyi' sajátfüggvénytől. (*Kvantum adiabatikus tétel.*)

Az adiabatikus közelítés feltétele $(n \neq k)$:

$$\langle \varphi_k(t) | H(t) | \varphi_n(t)\rangle = E_n(t)\langle \varphi_k(t) | \varphi_n(t)\rangle = 0 \tag{475}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle \varphi_k(t) | H(t) | \varphi_n(t)\rangle &= \langle \dot{\varphi}_k(t) | H(t) | \varphi_n(t)\rangle + \left\langle \varphi_k(t) | \dot{H}(t) | \varphi_n(t)\right\rangle + \langle \varphi_k(t) | H(t) | \dot{\varphi}_n(t)\rangle \\
&= E_n(t)\langle \dot{\varphi}_k(t) | \varphi_n(t)\rangle + E_k(t)\langle \varphi_k(t) | \dot{\varphi}_n(t)\rangle + \left\langle \varphi_k(t) | \dot{H}(t) | \varphi_n(t)\right\rangle \\
&= (E_k(t) - E_n(t))\langle \varphi_k(t) | \dot{\varphi}_n(t)\rangle + \left\langle \varphi_k(t) | \dot{H}(t) | \varphi_n(t)\right\rangle
\end{aligned} \tag{476}$$

$$\Downarrow$$

$$\langle \varphi_k(t) | \dot{\varphi}_n(t)\rangle = \frac{\left\langle \varphi_k(t) | \dot{H}(t) | \varphi_n(t)\right\rangle}{E_n(t) - E_k(t)} \to 0 \tag{477}$$

Ez egy frekvencia mértékegységű mennyiség, melynek elhanyagolhatónak kell lennie a rendszer $k \to n$ átmenetéhez tartozó karakterisztikus frekvenciájához képest:

$$\left|\frac{\left\langle \varphi_k(t) | \dot{H}(t) | \varphi_n(t)\right\rangle}{E_n(t) - E_k(t)}\right| \ll |\omega_{kn}(t)| = \frac{1}{\hbar}|E_n(t) - E_k(t)| \tag{478}$$

azaz

$$\underline{\hbar\left|\left\langle \varphi_k(t) | \dot{H}(t) | \varphi_n(t)\right\rangle\right| \ll (E_n(t) - E_k(t))^2} \tag{479}$$

Vizsgáljuk meg a geometriai fázist! A (466) egyenletből nyilvánvaló, hogy $\gamma_k(t) \in R$. Másrészt,

$$\langle \varphi_k(t) | \dot{\varphi}_k(t)\rangle \equiv \dot{R}(t)\,\langle \varphi_k(R(t)) | \nabla_R\varphi_k(R(t))\rangle \tag{480}$$

amiből

$$\gamma_k(t) = i\int_{t_0}^{t} \langle \varphi_k(t') | \dot{\varphi}_k(t') \rangle \, dt' = \int_{t_0}^{t} \langle \varphi_k(R(t')) | \nabla_R \varphi_k(R(t')) \rangle \; \dot{R}(t')\, dt' \tag{481}$$

$$= i\int_{R(t_0)}^{R(t)} \langle \varphi_k(R') | \nabla_{R'} \varphi_k(R') \rangle \; dR' \tag{482}$$

tehát a geometriai fázis az

$$A_k(R) = i \langle \varphi_k(R) | \nabla_R \varphi_k(R) \rangle \tag{483}$$

Berry-féle vektorpotenciál paramétertérben vett vonalintegráljával fejezhető ki:

$$\underline{\gamma_k(t) = \int_{R(t_0)}^{R(t)} A_k(R')\, dR'}\,. \tag{484}$$

8.1. Mértéktranszformáció

Legyen $\alpha(R)$ egy valósértékű függvény a paramétertéren és vezessük be a

$$\widetilde{\varphi}_k(R) = e^{i\alpha(R)} \varphi_k(R) \tag{485}$$

bázisfüggvényeket, melyek továbbra is a $H(R)$ Hamilton operátor sajátfüggvényei. Ekkor $A_k(R)$ az alábbi módon transzformálódik,

$$\widetilde{A}_k(R) = i \langle \widetilde{\varphi}_k(R) | \nabla_R \widetilde{\varphi}_k(R) \rangle = A_k(R) - \nabla_R \alpha(R) \;, \tag{486}$$

ami igazolja a vektorpotenciál elnevezést. A geometriai fázis transzformációja:

$$\widetilde{\gamma}_k(t) = \int_{R(t_0)}^{R(t)} \widetilde{A}_k(R')\, dR' = \gamma_k(t) - \alpha(R(t)) + \alpha(R(t_0)) \;, \tag{487}$$

így a (476) adiabatikus hullámfüggvény transzformációja:

$$\begin{aligned} \widetilde{\psi}^{ad}(t) &= e^{-id_k(t)} e^{i\widetilde{\gamma}_k(t)} \widetilde{\varphi}_k(t) = e^{-id_k(t)} e^{i\gamma_k(t)} e^{-i\alpha(R(t))} e^{i\alpha(R(t_0))} \widetilde{\varphi}_k(t) \\ &= e^{-id_k(t)} e^{i\gamma_k(t)} \varphi_k(t) = \psi^{ad}(t) \end{aligned} \tag{488}$$

azaz az adiabatikus hullámfüggvény invariáns a bázisfüggvények mértéktranszformációjára.

Gondolhatnánk azt, hogy

$$\alpha(R(t)) = \gamma_k(t) \tag{489}$$

választással a gemetriai fázis zérussá tehető:

$$\widetilde{\gamma}_k(t) \equiv 0 \tag{490}$$

$$\Downarrow$$

$$\widetilde{\psi}^{ad}(t) = e^{-id_k(t)} \widetilde{\varphi}_k(t) \;, \tag{491}$$

így annak bevezetésére nincs is szükség (*Vladimir Fock következtetése*).

8.2. Ciklikus mozgás

Nyilvánvaló ellentmondásra jutunk viszont, ha a paraméteres időfüggés olyan, hogy T periódusidő alatt visszatérünk a kiindulási paraméterekhez:

$$R\left(t_0+T\right)=R\left(t_0\right)\ . \tag{492}$$

Ekkor a $\widetilde{\varphi}_k\left(R\right)$ bázisfüggvények egyértékűsége miatt

$$e^{i\alpha(R(t_0+T))}=e^{i\alpha(R(t_0))} \tag{493}$$

kell, hogy teljesüljön, amiből

$$\alpha\left(R\left(t_0+T\right)\right)=\alpha\left(R\left(t_0\right)\right)+2\pi k \quad (k\in Z) \tag{494}$$

és a (491) mértékválasztás miatt

$$\widetilde{\gamma}_k\left(t_0+T\right)=\gamma_k\left(t_0+T\right)-\alpha\left(R\left(t_0+T\right)\right)+\alpha\left(R\left(t_0\right)\right)=\gamma_k\left(t_0+T\right)+2\pi k \tag{495}$$

következik. A mértéktranszformált adiabatikus hullámfüggvény:

$$\begin{aligned}\widetilde{\psi}^{ad}\left(t_0+T\right)&=e^{-id_k(t_0+T)}e^{i\widetilde{\gamma}_k(t_0+T)}\widetilde{\varphi}_k\left(t_0+T\right)=e^{-id_k(t_0+T)}e^{i\gamma_k(t_0+T)}\widetilde{\varphi}_k\left(t_0+T\right)\\&=e^{-id_k(t_0+T)}e^{i\gamma_k(t_0+T)}\widetilde{\varphi}_k\left(t_0\right)=e^{-id_k(t_0+T)}e^{i\gamma_k(t_0+T)}\,\widetilde{\psi}^{ad}\left(t_0\right)\end{aligned} \tag{496}$$

azaz a mértéktranszformáció nem tünteti el a geometriai fázisfaktort. Ezért a paramétertérben egy C zárt görbén történő (ciklikus) mozgás során a hullámfüggvény a dinamikus fázis mellett mindenképpen 'felszed' egy geometriai fázist

$$\gamma_k\left(C\right)=\oint_C A_k\left(R\right)dR+2\pi k \tag{497}$$

amit *Berry-fázisnak* nevezünk.

Az egyszerűség kedvéért a továbbiakban tekintsünk *háromdimenziós paraméterteret.* Az ismert Stokes-tétel miatt a Berry-fázis átalakítható a

$$\gamma_k\left(C\right)=\int_S\overrightarrow{B}_k(\overrightarrow{R})d^2S+2\pi k \tag{498}$$

alakban, ahol a felületi integrált a C görbe által határolt S felületre végezzük el és a

$$\overrightarrow{B}_k(\overrightarrow{R})=\nabla_{\overrightarrow{R}}\times\overrightarrow{A}_k(\overrightarrow{R}) \tag{499}$$

mennyiséget szokás *Berry-féle görbületi vektormezőnek* nevezni. Nyilvánvaló, hogy $\overrightarrow{B}_k\left(\overrightarrow{R}\right)$ mértékinvariáns:

$$\widetilde{\overrightarrow{B}}_k(\overrightarrow{R})=\nabla_{\overrightarrow{R}}\times\widetilde{\overrightarrow{A}}_k(\overrightarrow{R})=\nabla_{\overrightarrow{R}}\times\overrightarrow{A}_k(\overrightarrow{R})-\underbrace{\nabla_{\overrightarrow{R}}\times\nabla_{\overrightarrow{R}}\alpha(\overrightarrow{R})}_{=0}=\overrightarrow{B}_k(\overrightarrow{R})\,. \tag{500}$$

Továbbá:

$$\overrightarrow{B}_k(\overrightarrow{R})=i\,\nabla_{\overrightarrow{R}}\times\langle\varphi_k(\overrightarrow{R})|\nabla_{\overrightarrow{R}}\varphi_k(\overrightarrow{R})\rangle=i\langle\nabla_{\overrightarrow{R}}\varphi_k(\overrightarrow{R})|\times\nabla_{\overrightarrow{R}}\varphi_k(\overrightarrow{R})\rangle \tag{501}$$

azaz

$$B_k^\alpha(\overrightarrow{R})=i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\langle\partial_\beta\varphi_k(\overrightarrow{R})|\partial_\gamma\varphi_k(\overrightarrow{R})\rangle=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}F_k^{\beta\gamma}(\overrightarrow{R})\,, \tag{502}$$

ahol

$$F_k^{\beta\gamma}(\overrightarrow{R}) = -\,\mathrm{Im}\langle \partial_\beta \varphi_k(\overrightarrow{R})|\partial_\gamma \varphi_k(\overrightarrow{R})\rangle \tag{503}$$

a *Berry-féle görbületi (feszültség) tenzor*, melynek alternatív alakja:

$$F_k^{\beta\gamma}(\overrightarrow{R}) = -\,\mathrm{Im}\sum_{n(\neq k)} \langle \partial_\beta \varphi_k(\overrightarrow{R})|\varphi_n(\overrightarrow{R})\rangle\langle \varphi_n(\overrightarrow{R})|\partial_\gamma \varphi_k(\overrightarrow{R})\rangle \tag{504}$$

$$= -\,\mathrm{Im}\sum_{n(\neq k)} \frac{\langle \varphi_k(\overrightarrow{R})|\partial_\beta H(\overrightarrow{R})|\varphi_n(\overrightarrow{R})\rangle\langle \varphi_n(\overrightarrow{R})|\partial_\beta H(\overrightarrow{R})|\varphi_k(\overrightarrow{R})\rangle}{\left(E_n(\overrightarrow{R}) - E_k(\overrightarrow{R})\right)^2}\,. \tag{505}$$

Innen kapjuk a Berry-görbület számítására alkalmas formulát:

$$\overrightarrow{B}_k(\overrightarrow{R}) = -\,\mathrm{Im}\sum_{n(\neq k)} \frac{\langle \varphi_k(\overrightarrow{R})|\nabla_{\overrightarrow{R}} H(\overrightarrow{R})|\varphi_n(\overrightarrow{R})\rangle \times \langle \varphi_n(\overrightarrow{R})|\nabla_{\overrightarrow{R}} H(\overrightarrow{R})|\varphi_k(\overrightarrow{R})\rangle}{\left(E_n(\overrightarrow{R}) - E_k(\overrightarrow{R})\right)^2}\,. \tag{506}$$

8.3. Degeneranciák kezelése

A fenti formulából kiindulva kiszámolhatjuk a Berry-fázist egy *kétszeres degenerancia* közelében. Legyen

$$E_m(\overrightarrow{R}^*) = E_k(\overrightarrow{R}^*) = E(\overrightarrow{R}^*) \tag{507}$$

és $\overrightarrow{R}$ legyen $\overrightarrow{R}^*$ kis környezetében, ahol

$$\left|E_n(\overrightarrow{R}) - E_k(\overrightarrow{R})\right| \gg \left|E_m(\overrightarrow{R}) - E_k(\overrightarrow{R})\right| \quad (n \neq m, k)\ , \tag{508}$$

azaz a paramétertér ezen tartományában a Hamilton-operátor többi sajátértéke messze van. Ekkor használható az alábbi közelítés:

$$\overrightarrow{B}_k(\overrightarrow{R}) \simeq -\,\mathrm{Im}\, \frac{\langle \varphi_k(\overrightarrow{R})|\nabla_{\overrightarrow{R}} H(\overrightarrow{R})|\varphi_m(\overrightarrow{R})\rangle \times \langle \varphi_m(\overrightarrow{R})|\nabla_{\overrightarrow{R}} H(\overrightarrow{R})|\varphi_k(\overrightarrow{R})\rangle}{\left(E_m(\overrightarrow{R}) - E_k(\overrightarrow{R})\right)^2} \tag{509}$$

Alkalmazva az $\overrightarrow{R} \to \overrightarrow{R} - \overrightarrow{R}^*$ eltolást a paramétertérben,

$$E_m(\overrightarrow{0}) = E_k(\overrightarrow{0}) = E(\overrightarrow{0}) \tag{510}$$

és a $\left\{|\varphi_k(\overrightarrow{0})\rangle, |\varphi_m(\overrightarrow{0})\rangle\right\}$ kétdimenziós altérben a Hamilton operátor mátrixa a

$$H(\overrightarrow{R}) = \overrightarrow{\sigma} \cdot \mathbf{C}\overrightarrow{R} \tag{511}$$

alakban közelíthető, ahol $\mathbf{C}$ egy 3x3-as valós mátrix. Térjünk át az $\overrightarrow{R}' = 2\mathbf{C}\overrightarrow{R}$ paraméterekre:

$$H(\overrightarrow{R}') = \frac{1}{2}\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{R}' \tag{512}$$

melynek sajátértékei

$$E_\pm(\overrightarrow{R}') = \pm\frac{R'}{2}. \tag{513}$$

A koordinátarendszert úgy elforgatva, hogy $\overrightarrow{R}' = (0,0,R')$, azaz z-irányú legyen, a sajátfüggvények

$$|\varphi_+(\overrightarrow{R}')\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \;,\; |\varphi_-(\overrightarrow{R}')\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \;, \tag{514}$$

ezért $\nabla_{\overrightarrow{R}'} H(\overrightarrow{R}') = \frac{1}{2}\sigma$ figyelembevételével:

$$\langle\varphi_-(\overrightarrow{R}')|\nabla_{\overrightarrow{R}'} H(\overrightarrow{R}')|\varphi_+(\overrightarrow{R}')\rangle = \frac{1}{2}\langle\varphi_-(\overrightarrow{R}')|\overrightarrow{\sigma}|\varphi_+(\overrightarrow{R}')\rangle = \frac{1}{2}(1,i,0) \tag{515}$$

$$\langle\varphi_+(\overrightarrow{R}')|\nabla_{\overrightarrow{R}'} H(\overrightarrow{R}')|\varphi_-(\overrightarrow{R}')\rangle = \frac{1}{2}\langle\varphi_+(\overrightarrow{R}')|\overrightarrow{\sigma}|\varphi_-(\overrightarrow{R}')\rangle = \frac{1}{2}(1,-i,0) \tag{516}$$

és

$$\overrightarrow{B}_+(\overrightarrow{R}') = -\frac{1}{4R'^2}\,\mathrm{Im}\,(1,-i,0)\times(1,i,0) = -\frac{1}{2R'^2}(0,0,1) = -\frac{\overrightarrow{e}'_z}{2R'^2} \tag{517}$$

A koordinátarendszert visszaforgatva:

$$\overrightarrow{B}_+(\overrightarrow{R}') = -\frac{\overrightarrow{R}'}{2R'^3} = -\overrightarrow{B}_-(\overrightarrow{R}') \tag{518}$$

a paramétertérben egy $-\frac{1}{2}$ erősségű mágneses monopólus terének felel meg.
A Berry-fázis egy a degeneráció-pont közelében C zárt görbén történő ciklikus mozgás esetén:

$$\gamma_+(C) = -\int_S \frac{\overrightarrow{R}'}{2R'^3} d^2S' = -\int_S \frac{\overrightarrow{R}'}{2R'^3}\frac{\overrightarrow{R}'}{R'} R'^2 d\Omega = -\frac{1}{2}\Omega(C) \tag{519}$$

ahol $C = \partial S$ és $\Omega(C)$ az a térszög, amely alatt a C zárt görbe látszik a degeneráció $\overrightarrow{R}^*$ pontja alól.

8.4. Spin mágneses térben

Legyen a Hamilton operátor

$$H\left(\overrightarrow{R}(t)\right) = \frac{g\mu_B}{\hbar}\overrightarrow{S}\,\overrightarrow{R}(t) \tag{520}$$

ahol $\overrightarrow{R}(t)$ az időben változó mágneses indukció, g a giromágneses faktor, μ_B a Bohr-magneton és $\overrightarrow{S} = (S_x, S_y, S_z)$ egy $s-$spin operátorai. Az energia sajátértékek:

$$E_m(\overrightarrow{R}) = g\mu_B m R \tag{521}$$

ahol $R = |\overrightarrow{R}|$, ahol $m = -s, -s+1, \ldots, s-1, s$. Az m-ik sajátállapothoz tartozó Berry-féle görbületi vektor:

$$\overrightarrow{B}_m(\overrightarrow{R}) = -\frac{1}{\hbar^2}\,\mathrm{Im}\sum_{n(\neq m)}\frac{\langle m|\overrightarrow{S}|n\rangle\times\langle n|\overrightarrow{S}|m\rangle}{R^2(n-m)^2} \tag{522}$$

A sajátállapotokat úgy kapjuk, hogy alkalmazzuk az $O\in O(3)$ ortogonális transzformációt úgy, hogy $\overrightarrow{R}$ a z tengely irányába mutasson:

$$\overrightarrow{S}\,\overrightarrow{R} = (O\overrightarrow{S})(O\overrightarrow{R}) = (O\overrightarrow{S})\,(0,0,R) \tag{523}$$

valamint

$$O\overrightarrow{S} = U^{-1}\overrightarrow{S}U \tag{524}$$

ahol $U \in SU(2)$. A Hamilton operátort az új korrdinátrendszerre transzformálva:

$$H(\overrightarrow{R}) = U^{-1} H'(\overrightarrow{R}) U \tag{525}$$

$$H'(\overrightarrow{R}) = \frac{g\mu_B}{\hbar} S_z R\,, \tag{526}$$

az $|m\rangle'$ sajátállapotokra fennáll, hogy

$$H'(\overrightarrow{R})\,|m\rangle' = E_m(R)\,|m\rangle' \tag{527}$$

$$\overrightarrow{S}^2\,|m\rangle' = \hbar^2 s(s+1)\,|m\rangle' \tag{528}$$

$$S_z\,|m\rangle' = \hbar m_s\,|m\rangle' \tag{529}$$

$$S_\pm\,|m\rangle' = \hbar\sqrt{s(s+1) - m(m\pm 1)}\,|m\pm 1\rangle'\ . \tag{530}$$

Innen megkapjuk az eredeti Hamilton.operátor sajátállapotait:

$$U H(\overrightarrow{R}) U^{-1}\,|m\rangle' = E_m(R)\,|m\rangle' \tag{531}$$

$$\Downarrow$$

$$|m\rangle = U^{-1}\,|m\rangle'\ . \tag{532}$$

Ekkor

$$\overrightarrow{B}_m(\overrightarrow{R}) = -\frac{1}{\hbar^2}\,\mathrm{Im}\sum_{n(\neq m)}\frac{\langle m|\overrightarrow{S}|n\rangle \times \langle n|\overrightarrow{S}|m\rangle}{R^2(n-m)^2} = -\frac{1}{\hbar^2}\,\mathrm{Im}\sum_{n(\neq m)}\frac{'\langle m|U\overrightarrow{S}U^{-1}|n\rangle' \times {}'\langle n|U\overrightarrow{S}U^{-1}|m\rangle'}{R^2(n-m)^2} \tag{533}$$

$$= -\frac{1}{\hbar^2}\,\mathrm{Im}\sum_{n(\neq m)}\frac{'\langle m|O^{-1}\overrightarrow{S}|n\rangle' \times {}'\langle n|O^{-1}\overrightarrow{S}|m\rangle'}{R^2(n-m)^2} = O^{-1}\overrightarrow{B}'_m(R) \tag{534}$$

ahol

$$\overrightarrow{B}'_m(R) = -\frac{1}{\hbar^2}\,\mathrm{Im}\sum_{n(\neq m)}\frac{'\langle m|\overrightarrow{S}|n\rangle' \times {}'\langle n|\overrightarrow{S}|m\rangle'}{R^2(n-m)^2}\,. \tag{535}$$

Mivel csak átlónkívüli mátrixelemekkel van dolgunk, S_z mátrixelemei nem szerepelnek a fenti kifejezésben, ezért

$$\overrightarrow{B}'_m(R) = (0, 0, B'^z_m(R)) \tag{536}$$

ahol

$$\begin{aligned} B'^z_m(R) = -\frac{1}{\hbar^2 R^2}\,\mathrm{Im}\big\{ &{}'\langle m|S_x|m+1\rangle'\,{}'\langle m+1|S_y|m\rangle' - {}'\langle m|S_y|m+1\rangle'\,{}'\langle m+1|S_x|m\rangle' \\ &+ {}'\langle m|S_x|m-1\rangle'\,{}'\langle m-1|S_y|m\rangle' - {}'\langle m|S_y|m-1\rangle'\,{}'\langle m-1|S_x|m\rangle' \big\} \end{aligned} \tag{537}$$

$$= -\frac{1}{R^2}\,\mathrm{Im}\,\frac{1}{4i}\left\{2s(s+1) - 2m(m+1) - 2s(s+1) + 2m(m-1)\right\} \tag{538}$$

$$= -\frac{m}{R^2} \tag{539}$$

Innen az O^{-1} visszaforgatással kapjuk a Berry-féle 'görbületi' vektorra:

$$\overrightarrow{B}_m(\overrightarrow{R}) = -m\frac{\overrightarrow{R}}{R^3} \tag{540}$$

és a Berry-fázisra:

$$\gamma_m(C) = \oint \overrightarrow{B}_m(\overrightarrow{R})\,d^2S = -m\,\Omega(C)\ . \tag{541}$$

9. Klasszikus elektrodinamika (kivonatos ismétlés)

9.1. Maxwell-egyenletek

Elektromos eltolás, térerősség és polarizáció vektorok:

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$$

Mágneses térerősség, indukció és mágnesezettség vektorok:

$$\vec{H} = \frac{\vec{B}}{\mu_0} - \vec{M}$$

Lorentz-erő:

$$\vec{F} = q\left(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}\right) \tag{542}$$

Maxwell egyenletek:

$$\vec{\nabla}\vec{D} = \rho \tag{543}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\partial_t \vec{B} \tag{544}$$

$$\vec{\nabla}\vec{B} = 0 \tag{545}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{j} + \partial_t \vec{D} \tag{546}$$

ahol ρ az elektromos töltéssűrűség és $\vec{j}$ az elektromos töltésáramsűrűség vektor.
Vákuumban $\vec{P} = 0$ és $\vec{M} = 0 \rightarrow \vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E}$ és $\vec{H} = \frac{\vec{B}}{\mu_0}$, tehát a Maxwell egyenletek:

$$\vec{\nabla}\vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \tag{547}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\partial_t \vec{B} \tag{548}$$

$$\vec{\nabla}\vec{B} = 0 \tag{549}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \left(\vec{j} + \varepsilon_0 \partial_t \vec{E}\right) \tag{550}$$

Skalárpotenciál $\phi(\vec{r}, t)$ és vektorpotenciál $\vec{A}(\vec{r}, t)$:

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \; (\rightarrow \vec{\nabla}\vec{B} = 0) \tag{551}$$

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \partial_t \vec{A} \; (\rightarrow \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\partial_t \vec{B}) \tag{552}$$

Mértékfüggvény $\Lambda(\vec{r}, t)$:

$$\left.\begin{array}{l} \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda \\ \phi' = \phi - \partial_t \Lambda \end{array}\right\} \rightarrow \begin{array}{l} \vec{E}' = \vec{E} \\ \vec{B}' = \vec{B} \end{array} \tag{553}$$

9.2. Lagrange formalizmus

Lagrange függvény:

$$L\left(\vec{r}, \dot{\vec{r}}\right) = -mc^2\sqrt{1 - \frac{\dot{\vec{r}}^2}{c^2}} + q\vec{A}(\vec{r}, t)\, \dot{\vec{r}} - q\phi(\vec{r}, t) \;\; . \tag{554}$$

Konjugált, *kanonikus impulzus:*

$$\vec{p} = \frac{\partial L\left(\vec{r},\dot{\vec{r}}\right)}{\partial \dot{\vec{r}}} = -\frac{mc^2\left(-2\frac{\dot{\vec{r}}}{c^2}\right)}{2\sqrt{1-\frac{\dot{\vec{r}}^2}{c^2}}} + q\vec{A}\left(\vec{r},t\right) =$$

$$= \frac{m\dot{\vec{r}}}{\sqrt{1-\frac{\dot{\vec{r}}^2}{c^2}}} + q\vec{A}\left(\vec{r},t\right) = \vec{K} + q\vec{A}\left(\vec{r},t\right) \ , \tag{555}$$

ahol $\vec{K}$ az ún. *kinetikus impulzus*:

$$\vec{K} = \frac{m\dot{\vec{r}}}{\sqrt{1-\frac{\dot{\vec{r}}^2}{c^2}}} = \vec{p} - q\vec{A} \, . \tag{556}$$

Mozgásegyenlet:

$$\frac{\partial L\left(\vec{r},\dot{\vec{r}}\right)}{\partial \vec{r}} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L\left(\vec{r},\dot{\vec{r}}\right)}{\partial \dot{\vec{r}}} = 0 \tag{557}$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{\partial L\left(\vec{r},\dot{\vec{r}}\right)}{\partial \vec{r}} = q(\vec{\nabla}\circ\vec{A})\dot{\vec{r}} - q\,\vec{\nabla}\phi \ , \tag{558}$$

ahol

$$(\vec{\nabla}\circ\vec{A})_{ij} = \partial_i\, A_j \ . \tag{559}$$

A mágneses indukcióvektor:

$$\vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A} \, , \tag{560}$$

azaz

$$B_k = \varepsilon_{kij}\,\partial_i\, A_j \quad , \tag{561}$$

melyből

$$\varepsilon_{kij}B_k = \varepsilon_{kij}\varepsilon_{knm}\partial_n\, A_m = \left(\delta_{in}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jn}\right)\,\partial_n\, A_m = \partial_i\, A_j - \partial_j\, A_i \ , \tag{562}$$

tehát

$$\partial_i\, A_j = \varepsilon_{kij}B_k + \partial_j\, A_i \ , \tag{563}$$

és

$$(\vec{\nabla}\circ\vec{A})\dot{\vec{r}} = \dot{\vec{r}}\times\vec{B} + (\dot{\vec{r}}\vec{\nabla})\,\vec{A} \, . \tag{564}$$

Másrészt

$$\frac{d\vec{A}}{dt} = \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} + (\dot{\vec{r}}\vec{\nabla})\,\vec{A} \, , \tag{565}$$

amiből

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = q\frac{d\vec{A}}{dt} - q\frac{\partial\vec{A}}{\partial t} - q\,\vec{\nabla}\phi + q(\dot{\vec{r}}\times\vec{B}) \ , \tag{566}$$

illetve

$$\frac{d\vec{K}}{dt} = -q\frac{\partial\vec{A}}{\partial t} - q\,\vec{\nabla}\phi + q(\dot{\vec{r}}\times\vec{B}) = q\vec{E} + q(\dot{\vec{r}}\times\vec{B}) \ , \tag{567}$$

a Lorentz erő, és felhasználtuk, hogy

$$\vec{E} = -\,\vec{\nabla}\phi - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} \, . \tag{568}$$

9.3. Hamilton formalizmus

A Hamilton függvény:

$$\begin{aligned}
H &= \dot{\vec{r}}\,\vec{p} - L\left(\vec{r},\dot{\vec{r}}\right) \\
&= \dot{\vec{r}}\,\vec{K} + q\vec{A}\,\dot{\vec{r}} + mc^2\sqrt{1-\frac{\dot{\vec{r}}^2}{c^2}} - q\vec{A}\,\dot{\vec{r}} + q\phi \\
&= \frac{m\dot{\vec{r}}^2}{\sqrt{1-\frac{\dot{\vec{r}}^2}{c^2}}} + mc^2\sqrt{1-\frac{\dot{\vec{r}}^2}{c^2}} + q\phi = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{\dot{\vec{r}}^2}{c^2}}} + q\phi \; .
\end{aligned} \tag{569}$$

Mivel

$$\frac{m^2c^4}{1-\frac{\dot{\vec{r}}^2}{c^2}} = m^2c^4 + c^2\frac{m\dot{\vec{r}}^2}{1-\frac{\dot{\vec{r}}^2}{c^2}} = m^2c^4 + c^2\vec{K}^2 = m^2c^4 + c^2\left(\vec{p}-q\vec{A}\right)^2 \; , \tag{570}$$

következik, hogy

$$H\left(\vec{r},\vec{p}\right) = \sqrt{(mc^2)^2 + c^2\left(\vec{p}-q\vec{A}\right)^2} + q\phi \; . \tag{571}$$

Ha

$$\frac{\left(\vec{p}-q\vec{A}\right)^2}{mc^2} \ll 1 \; , \tag{572}$$

akkor

$$H\left(\vec{r},\vec{p}\right) \simeq mc^2 + \frac{\left(\vec{p}-q\vec{A}\right)^2}{2m} + q\phi \; , \tag{573}$$

így *nem-relativisztikus tárgyalásban*

$$H\left(\vec{r},\vec{p}\right) = \frac{\left(\vec{p}-q\vec{A}\right)^2}{2m} + q\phi \; . \tag{574}$$

Mozgásegyenletek:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v} = \frac{\partial H\left(\vec{r},\vec{p}\right)}{\partial\vec{p}} = \frac{\vec{p}-q\vec{A}}{m} = \frac{\vec{K}}{m} \tag{575}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\vec{p}}{dt} &= -\frac{\partial H\left(\vec{r},\vec{p}\right)}{\partial\vec{r}} = q(\vec{\nabla}\circ\vec{A})\frac{\vec{p}-q\vec{A}}{m} - q\,\vec{\nabla}\phi = q(\vec{\nabla}\circ\vec{A})\dot{\vec{r}} - q\,\vec{\nabla}\phi \\
&= q(\dot{\vec{r}}\times\vec{B}) + q(\dot{\vec{r}}\vec{\nabla})\,\vec{A} - q\,\vec{\nabla}\phi = q(\dot{\vec{r}}\times\vec{B}) + q\frac{d\vec{A}}{dt} - q\frac{\partial\vec{A}}{\partial t} - q\,\vec{\nabla}\phi
\end{aligned}$$

Innen

$$\begin{aligned}
\frac{d\vec{K}}{dt} &= m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = q(-\vec{\nabla}\phi - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t}) + q(\dot{\vec{r}}\times\vec{B}) \\
&= q\vec{E} + q(\dot{\vec{r}}\times\vec{B}) \; .
\end{aligned} \tag{576}$$