

# Tartalom

|                                                                                       |           |
|---------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>BEVEZETŐ .....</b>                                                                 | <b>9</b>  |
| <b>A FEJEZETEK RÖVID ISMERTETÉSE .....</b>                                            | <b>11</b> |
| <b>1. FEJEZET</b>                                                                     |           |
| <b>AZ ELEKTROMÁGNESES HULLÁMOK HULLÁM-RÉSZECSKE KETTŐSSÉGÉHEZ</b>                     |           |
| <b>ELVEZETŐ KÍSÉRLETI EREDMÉNYEK.....</b>                                             | <b>13</b> |
| 1.1 A fény természetére vonatkozó elképzeléseink rövid történelmi áttekintése.....    | 13        |
| 1.1.1 A fény korpuszkuláris elmélete .....                                            | 13        |
| 1.1.2 A fény hullámtermészete .....                                                   | 14        |
| 1.1.3 A fény kettős természete .....                                                  | 14        |
| 1.2 Az elektromágneses hullámokról általában .....                                    | 15        |
| 1.3 Az elektromágneses hullámok hullámtulajdonságait igazoló kísérletek.....          | 16        |
| 1.4 Az elektromágneses hullámok részecsketulajdonságaira utaló modern kísérletek..... | 16        |
| 1.4.1 A feketetest-sugárzás .....                                                     | 16        |
| 1.4.2 A fényelektromos hatás.....                                                     | 19        |
| 1.4.3 A Compton-szórás .....                                                          | 21        |
| 1.5 Kvantumos (nem folytonos) viselkedés atomi szinten.....                           | 23        |
| 1.5.1 Diszkrét atomi spektrumok. A hidrogén atomi spektruma. ....                     | 23        |
| 1.5.2 A Franck–Hertz-kísérlet.....                                                    | 24        |
| 1.6 Javasolt feladatok .....                                                          | 26        |
| <b>2. FEJEZET</b>                                                                     |           |
| <b>KORAI KVANTUMMECHANIKA .....</b>                                                   | <b>27</b> |
| 2.1 A Bohr-modell .....                                                               | 27        |
| 2.1.1 A Bohr-féle kvantumhipotézis .....                                              | 27        |
| 2.1.2 A Bohr-modell levezetése .....                                                  | 28        |
| 2.1.3 A Bohr-modell eredményei. A hidrogénatom spektruma .....                        | 29        |
| 2.2 A Bohr–Sommerfeld-féle kvantálás .....                                            | 30        |
| 2.3 De Broglie kvantumhipotézise .....                                                | 32        |
| 2.4 A részecskékhez rendelt síkhullámok egyenlete.....                                | 33        |

|                                                                                                              |           |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 2.5 Davisson és Germer kísérlete .....                                                                       | 36        |
| 2.6 Javasolt feladatok .....                                                                                 | 38        |
| <b>3. FEJEZET</b>                                                                                            |           |
| <b>A HULLÁMFÜGGVÉNY ÉS A SCHRÖDINGER-EGYENLET .....</b>                                                      | <b>40</b> |
| 3.1 A hullámfüggvény fizikai értelmezése és normálása .....                                                  | 40        |
| 3.2 A hullámfüggvény sok részecskéből álló rendszerek esetére.....                                           | 42        |
| 3.3 A koordinátatérbeli és impulzustérbeli hullámfüggvény .....                                              | 43        |
| 3.4 Megtalálhatósági valószínűségek kiszámítása a hullámfüggvénnyel .....                                    | 44        |
| 3.5 A Schrödinger-egyenlet szabad részecskére .....                                                          | 45        |
| 3.6 Schrödinger-egyenlet kölcsönható részecskékre .....                                                      | 48        |
| 3.7 Elektromágneses térben mozgó elektromosan töltött részecskére felírt<br>Schrödinger-egyenlet .....       | 50        |
| 3.8 A Schrödinger-egyenlet sokrészecske-rendszerek esetén .....                                              | 51        |
| 3.9 Az időtől független Schrödinger-egyenlet .....                                                           | 51        |
| 3.10 A kontinuitási egyenlet .....                                                                           | 53        |
| 3.11 A Schrödinger-egyenlet az impulzustérbeli hullámfüggvény segítségével.....                              | 55        |
| 3.12 Átlagértékek kiszámítása az impulzus- és koordinátatérben felírt hullámfüggvények<br>segítségével ..... | 57        |
| 3.13 Javasolt feladatok .....                                                                                | 60        |
| <b>4. FEJEZET</b>                                                                                            |           |
| <b>A HULLÁMMECHANIKA MATEMATIKAI FORMALIZMUSA.....</b>                                                       | <b>62</b> |
| 4.1 A hullámfüggvények Hilbert-tere és tulajdonságai.....                                                    | 62        |
| 4.2 Ortonormált bázisok.....                                                                                 | 64        |
| 4.3 Az altér fogalma.....                                                                                    | 66        |
| 4.4 Operátorok.....                                                                                          | 66        |
| 4.5 Sajátértékek, sajátfüggvények .....                                                                      | 68        |

|                                                                                        |           |
|----------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>4.6 Mérési eredmények eloszlása .....</b>                                           | <b>72</b> |
| 4.6.1 Diszkrét sajátértékspektrumok esete .....                                        | 72        |
| 4.6.2 Folytonos sajátértékhalmoz .....                                                 | 73        |
| 4.6.3 Általános eset – diszkrét és folytonos spektrumok közös esete .....              | 77        |
| <b>4.7 Javasolt feladatok .....</b>                                                    | <b>78</b> |
| <br><b>5. FEJEZET</b>                                                                  |           |
| <b>KOMPATIBILIS ÉS KOMPLEMENTÁRIS FIZIKAI MENNYISÉGEK .....</b>                        | <b>80</b> |
| 5.1 A mérési posztulátum .....                                                         | 80        |
| 5.2 Kompatibilis fizikai mennyiségek .....                                             | 81        |
| 5.3 Teljes megfigyelhető mennyiségrendszer és a hullámfüggvény meghatározása .....     | 86        |
| 5.4 Nem kommutáló, komplementáris fizikai mennyiségek. Határozatlansági relációk. .... | 86        |
| 5.5 Javasolt feladatok .....                                                           | 89        |
| <br><b>6. FEJEZET</b>                                                                  |           |
| <b>EGYDIMENZIÓS KVANTUMMECHANIKAI RENDSZEREK ÁLTALÁNOS TULAJDONSÁGAI.....</b>          | <b>90</b> |
| 6.1 Az egydimenziós stacionárius Schrödinger-egyenlet.....                             | 90        |
| 6.2 Általános törvényszerűségek az egydimenziós Schrödinger-egyenlet megoldására ..... | 92        |
| 6.2.1 Konstans potenciál esete.....                                                    | 92        |
| 6.2.2 Általános potenciál egydimenziós feladatokra .....                               | 93        |
| 6.3 A sajátfüggvények paritása .....                                                   | 96        |
| 6.4. Példák egydimenziós kötött kvantummechanikai rendszerekre .....                   | 98        |
| 6.4.1 Végtelen mély potenciálgödör.....                                                | 98        |
| 6.4.2 Lineáris harmonikus oszcillátor .....                                            | 102       |
| 6.4.3 Véges mélységű potenciálvölgy .....                                              | 107       |
| 6.5 Példák egydimenziós végtelen mozgások esetére .....                                | 110       |
| 6.5.1 A potenciállépcső .....                                                          | 110       |
| 6.5.2 A Potenciálgát és az alagúthatás .....                                           | 115       |
| 6.6 Javasolt feladatok .....                                                           | 119       |

|                                                                            |            |
|----------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>7. FEJEZET</b>                                                          |            |
| <b>AZ IMPULZUSNYOMATÉK A KVANTUMMECHANIKÁBAN.....</b>                      | <b>121</b> |
| 7.1 Az impulzusnyomtékk-operátor tulajdonságai, kommutálási relációk ..... | 121        |
| 7.2 Sajátértékek és sajátfüggvények.....                                   | 124        |
| 7.3 Javasolt feladatok.....                                                | 127        |
| <b>8. FEJEZET</b>                                                          |            |
| <b>MOZGÁS CENTRÁLIS ERŐTÉR BEN .....</b>                                   | <b>128</b> |
| 8.1. A kéttest-probléma a klasszikus mechanikában .....                    | 128        |
| 8.2 A probléma kvantummechanikai megfogalmazása .....                      | 131        |
| 8.3 A radiális Schrödinger-egyenlet.....                                   | 132        |
| 8.4 A Coulomb típusú potenciál. Az egyelektronos atomok.....               | 135        |
| 8.5 A többelektronos atomok.....                                           | 141        |
| 8.6 A Bohr-pálya kvantummechanikai értelmezése .....                       | 143        |
| 8.7 Javasolt feladatok.....                                                | 144        |
| <b>FÜGGELÉK .....</b>                                                      | <b>146</b> |
| <b>I. Függelék</b>                                                         |            |
| <b>A valószínűség-számítás alapjai.....</b>                                | <b>146</b> |
| I.1 Alapfogalmak .....                                                     | 146        |
| I.2 Valószínűségi változó. Eloszlásfüggvény.....                           | 147        |
| I.3 Műveletek eseményekkel, összetett események .....                      | 148        |
| I.4 Fontos eloszlásfüggvények .....                                        | 149        |
| I.5 Várható érték (átlag), szórás, korreláció .....                        | 154        |
| <b>II. Függelék</b>                                                        |            |
| <b>A Dirac-delta funkcionál és tulajdonságai.....</b>                      | <b>157</b> |
| II.1 A Dirac-delta funkcionál és tulajdonságai.....                        | 157        |
| II.2 Részecske egy Dirac-delta alakú potenciálban .....                    | 159        |
| <b>III. Függelék</b>                                                       |            |
| <b>A nemrelativisztikus kvantummechanika rövid története .....</b>         | <b>162</b> |

## Bevezető

A kvantummechanika a XX. század egyik legvitatottabb és filozófiai szempontból legtöbb új gondolatot hozó elmélete. A relativitáselmülethez hasonlóan gyökerében változtatta meg a világról alkotott képünket, és a tudományos gondolkodás szempontjából addig elképzelhetetlen utakat és lehetőségeket nyitott meg. Joggal mondhatjuk azt, hogy a kvantummechanika háttérben álló fizikai valóságot a klasszikus mechanikára épített világnézetünkkel nehezen emészthetjük meg, és az elmélet mögött létező „végső valóságot” még nem ismerjük. A kvantummechanikát ezért úgy kell kezelni, mint jól működő módszert vagy eszközt, amelynek segítségével leírhatjuk az elemi részecskék mikroszkopikus világát.

Általában minden diák azt várja el a kvantummechanika előadástól, hogy választ kapjon arra a kérdésre, hogy mi okozza az elemi részecskék szintjén megfigyelhető, és klasszikusan elképzelhetetlen hullám–részecske dualitást. Csalódásukra azonban erre az alapkérdésre adott válasz és filozófiai fejtegetések helyett posztulátumokat és rengeteg matematikát találnak. Ezért a legtöbben elbátortalanodnak, és meg sem próbálják követni a kvantummechanika sajátos logikáját. Ahhoz, hogy ezt a csalódást elkerüljük, szükségesnek tartjuk itt, már az elején leszögezni, hogy a jelen könyv sem fog eltérni a kvantummechanika klasszikus könyveinek a programjától. Célunk nem egy filozófikus tárgyalásmód, hanem a fizikusok és kémikusok számára használható alapeszköznek a megismertetése. Ezen könyvecskét úgy kell tehát tekinteni, mint egy kvantummechanikai ABC-t, amelyben a kvantummechanika alapjait tárgyaljuk a kevésbé elvont hullámmechanika formalizmusát követve. A könyvben minimális, nélkülözhetetlen ismeretanyagot közlünk, amelyre minden olyan fizikus vagy kémikus diáknak szüksége lesz, aki a tudomány modernebb témaiban akar később előadásokat hallgatni. Alapfokú matematikai analízis és algebra egyetemi anyagra építünk, a kissé komplexebb matematikai ismereteket pedig igyekszünk a fejezetek során, illetve a függelékekben közölni. A könyv könnyebb követhetősége céljából a számítások nagy részét részletesen elvégezzük. Nagy hangsúlyt próbáltunk fektetni a kvantummechanikai gondolkodásmód logikus és ellentmondásmentes bevezetésére, a használt posztulátumrendszer lerögzítésére, illetve néhány elemi feladat átfogó jellegű tárgyalására.

E könyvben felvázolt hullámmechanika ABC az elemi kvantummechanika előadások és szemináriumok többéves tanítása során tisztázódott. Az előadások, illetve a jelen könyv megszerkesztése során sok tekintetben

köveltük azoknak a csodálatos kvantummechanikai leckéknek a programját és anyagát, amelyeket Maria Cristea tanárnő a kolozsvári Babeş–Bolyai Tudományegyetem Fizika Karán tanított. Ezen könyvecskét a felejthetetlen Maria Cristea tanárnő emlékének ajánljuk.

A szerzők

Kolozsvár, 2005. október 1.

## A fejezetek rövid ismertetése

### **1. FEJEZET Az elektromágneses hullámok hullám-részecske kettősségéhez elvezető kísérleti eredmények**

Ismertetjük azokat a kísérleti tényeket, amelyek elvezettek a fény és az elemi részecskék kettős (részecske és hullám) természetének az elfogadásához, illetve a kvantummechanika megalkotásához. A kísérletek részletes leírása nem képezi a kvantummechanika tárgykörét, általában az atomfizika és optika keretében szokták tárgyalni. A tárgyalás teljességének az érdekében itt nagyon röviden mégis összegezzük ezeket a lényeges kísérleti eredményeket.

### **2. FEJEZET Korai kvantummechanika**

Olyan kezdeti elméleti próbálkozásokat ismertetünk, amelyek az előző fejezetben vázolt kísérleti tényeket aránylag egyszerűen, klasszikus mechanikai gondolkodásmódot alkalmazva magyarázzák. Ezen elméletek megalapozása nem teljesen ellentmondásmentes, furcsán ötvözik a klasszikus és kvantummechanikai gondolkodásmódot. Tudománytörténeti szempontból és a rigorózus kvantummechanikai logika felé vezető út kialakításában azonban mérföldkövet jelentenek.

### **3. FEJEZET A hullámfüggvény és a Schrödinger-egyenlet**

Posztulátumok segítségével megalapozzuk a kvantummechanikát. Részletesen tárgyaljuk a mozgó részecskéket jellemző hullámfüggvényt, ennek fizikai értelmezést adunk, bevezetjük az impulzustérbeli hullámfüggvényt, és posztuláljuk a hullámfüggvény evolúcióját megadó egyenletet. Ez az egyenlet lesz a híres Schrödinger-egyenlet.

### **4. FEJEZET A hullámmechanika matematikai formalizmusa**

A kvantummechanikában intuitív, fizikai alapon bevezetett hullámfüggvényeknek és operátoroknak precízebb matematikai leírását adjuk.

### **5. FEJEZET Kompatibilis és komplementáris fizikai mennyiségek**

Behatóan foglalkozunk a mérési folyamattal a kvantummechanikában. Megvizsgáljuk, hogy mi történik, ha egymás után több fizikai mennyiséget mérünk egy adott kvantummechanikai állapotból kiindulva. Tárgyaljuk a kompatibilis és komplementáris fizikai mennyiségek jelentését, és bebizonyítjuk általános esetben a határozatlansági összefüggéseket. Speciális esetként visszakapjuk a híres Heisenberg-féle határozatlansági összefüggéseket.

## **6. FEJEZET Egydimenziós kvantummechanikai rendszerek általános tulajdonságai**

A stacionárius Schrödinger-egyenletet fogjuk megoldani néhány alapvető egydimenziós rendszer esetén. Az egydimenziós feladatok általános tulajdonságainak a tárgyalása után a következő konkrét egydimenziós feladatokat oldjuk meg: kvantummechanikai részecske végtelen mély és véges mélységű potenciálvölgyben, lineáris harmonikus oszcillátor, potenciállépcső és potenciálgát. Számos érdekes és a klasszikus mechanikában nem várt eredménnyel ismerkedünk meg.

## **7. FEJEZET Az impulzusnyomaték a kvantummechanikában**

A klasszikus mechanikában centrális erőterben való mozgás esetén az impulzusnyomatéknak mint mozgásállandónak kitüntetett szerepe van. A centrális erőterekben (például elektronok az atommag elektrosztatikus terében) az impulzusnyomatéknak kitüntetett szerepe lesz a kvantummechanika keretében is. Meglátjuk azonban, hogy a kvantummechanikában az impulzusnyomaték-vektor tulajdonságai számos tekintetben eltérnek a klasszikusan megszokottól.

## **8. FEJEZET Mozgás centrális erőterben**

Tanulmányozzuk egy részecske centrális erőterben való mozgásának a kvantummechanikai sajátosságait. A tárgyalt feladat a hidrogénatom és a többielektronos atomok kvantummechanikai leírásához vezet el bennünket. Meghatározzuk a hidrogén-típusú (egyelektronnal rendelkező) atomok esetén a kvantummechanikai rendszer stacionárius állapotaiban a hullámfüggvényeket, az energia-sajátértékeket és az állapotokat jellemző kvantumszámok lehetséges értékeit, valamint ezek fizikai jelentését. Röviden, és matematikai bizonyítások nélkül tárgyaljuk a többielektronos atomok esetét is.

## **I. Függelék A valószínűség-számítás alapjai**

Röviden tárgyaljuk a valószínűség-számítás azon alapjait, amelyeket a kvantummechanika tárgyalása során felhasználunk. Bevezetjük a diszkrét és folytonos valószínűségi változókat, ezeknek az eloszlásfüggvényét, a lényeges és gyakran előforduló eloszlásokat, illetve a valószínűségi változókat jellemző mennyiségeket.

## **II. Függelék A Dirac-delta funkcionál és tulajdonságai**

A könyvben sokszor használt Dirac-delta funkcionál tulajdonságait tárgyaljuk. Gyakorlatként és példaként az egydimenziós rendszerekre megoldjuk a stacionárius Schrödinger-egyenletet Dirac-delta alakú potenciálvölgyben található részecske esetére.

## **III. Függelék A nemrelativisztikus kvantummechanika rövid története**

Röviden, időrendi sorrendben összefoglaljuk a kvantummechanika kilakulásának mérföldköveit.

# 1. FEJEZET

## Az elektromágneses hullámok hullám-részecske kettősségéhez elvezető kísérleti eredmények

A fejezet keretében ismertetjük azokat a kísérleti tényeket, amelyek elvezettek a fény és az elemi részecskék kettős (részecske és hullám) természetének az elfogadásához, illetve a kvantummechanika megalkotásához. A kísérletek részletes leírása nem képezi a kvantummechanika tárgykörét, általában az atomfizika és optika keretében szokták őket tárgyalni. A tárgyalás teljességének a kedvéért itt nagyon röviden összegezzük ezeket a lényeges kísérleti eredményeket.

### **1.1 A fény természetére vonatkozó elképzeléseink rövid történelmi áttekintése**

A fény mindig is foglalkoztatta az embereket, mert rengeteg közünk van a fényhez. A fényhez kötődik az ember legfontosabb érzékszerve, a szem, és ezen keresztül a látás. Ezen az információs csatornán keresztül kapjuk a legtöbb és legrészletesebb információt a természetről – a vizuális információ szerepe mindig is nagyon hangsúlyozott volt, de napjainkban különösen. Akár azt is mondhatnánk, hogy a mai fizikánk fényre van „mérétezve”. A fény természetével, fizikai leírásával tudományos módon azonban csak a XVII. században kezdtek el foglalkozni. Az első próbálkozások, amelyekkel tudományosan igyekeztek leírni a fényt, Isaac Newton és Christian Huygens nevéhez fűződnek.

#### **1.1.1 A fény korpuszkuláris elmélete**

Newton úgy próbálta leírni a fényt, mint ami nagyon sok kis egyforma részecskéből áll (fény korpuszculák). Ezek a részecskék nagy sebességű egyenes vonalú mozgást végeznek, amikor pedig egy felülettel találkoznak, akkor vagy visszapattanak róla, vagy pedig behatolnak, és megváltozott sebességgel tovaterjednek az új közegben. Ezzel a modellel megérthető a fény terjedése, visszaverődése és törése is. A korpuszkuláris elméletet egy ideig kiszorította a fény hullámelmélete, de a XIX. század végén és a XX. század elején olyan kísérleteket végeztek, amelyeket újból csak a korpuszkuláris

elmélettel lehetett magyarázni (Compton-szórás, fényelektromos hatás, feketetest-sugárzás).

### 1.1.2 A fény hullámtermészete

Huygens úgy képzelte el a fényt, mint egy mechanikai hullámot. Mechanikai hullámról beszélünk például akkor, amikor egy kifeszített húrt az egyik végén a húrra merőlegesen megmozdítunk. Ha a mozgást periodikusan ismétljük, akkor a húrban ez a rezgőmozgás hullám formájában tovaterjed. A mechanikai hullám fogalmát ki lehet terjeszteni két- és háromdimenzióra is. Kétdimenzióban például képzeljünk el egy dobfelületet, amelyet megüt a dobos – a perturbáció itt is tovaterjed, és állóhullámok kialakulását eredményezheti. Másik jól ismert példa a nyugodt vízfelület, amelybe egy követ dobunk. Háromdimenzióban terjedő hullám például a hang. A fény hullámelmélete a fénysugarat úgy kezeli mint adott közegben tovaterjedő hullámot (ezt a közeget nevezték el éternek). Ezzel a modellel is megérthető a fény terjedése, visszaverődése és törése, ezeknek nagyon elegáns magyarázatát adja az optikából ismert Huygens–Fresnel-elv. A fény hullámtermészetének figyelembevételével megmagyarázhatóvá válnak olyan jelenségek is (diffrakció, interferencia), amelyeket a korpuszkulaelmélettel nem lehet megérteni. Maxwell munkássága nyomán tisztázódott az is, hogy milyen típusú hullám a fény, és mi az, ami a fényhullám esetén tovaterjed. Bebizonyosodott, hogy a fény tranzverzális elektromágneses hullám. A Maxwell-egyenletek alapján kiszámítható a fény terjedési sebessége is, amely igen jó egyezést mutat a mért értékkel. Ez a fény hullámelméletének újabb, igen lényeges sikerét jelenti.

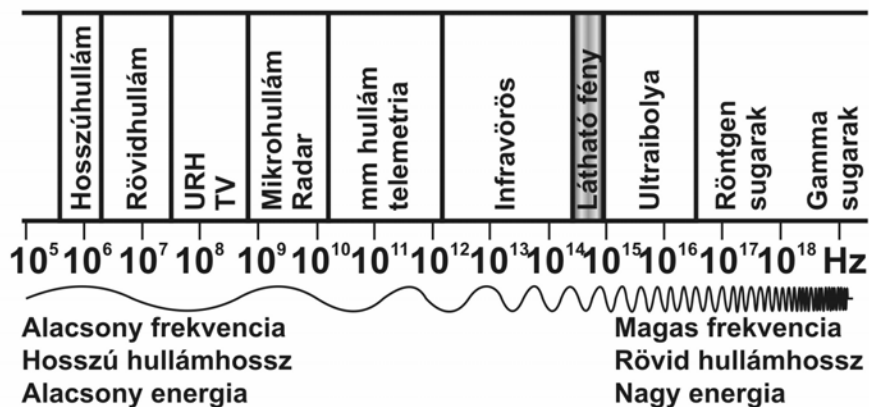
### 1.1.3 A fény kettős természete

A XVII. században úgy gondolták, hogy a két létező alapmodell közül (részecske- és hullámmódel) csak az egyik lehet igaz, a másik modellnek egy idő után feltétlenül hamisnak kell bizonyulnia. Ez nagy horderejű tudományos vitához vezetett Huygens és Newton között. Mai ismereteink birtokában azonban szükségünk van mindkét modellre (képre) ahhoz, hogy különböző jelenségeket megmagyarázhassunk. Azt gondoljuk, hogy a fénynek kettős természete van: részecske- és hullámtermészete. A részecske és a hullám fogalmát a klasszikus mechanikában vezettük be, értelmeztük, itt vált érthetővé számunkra, hogy mit jelent a részecsketermészet, és mit jelent a hullámtermészet. Ezek a megközelítések valójában csak a klasszikus mechanika területén érvényesek, ennek ellenére megpróbáljuk őket alkalmazni olyan objektumra (a fényre), amely nem a klasszikus mechanika

vizsgálódásának a tárgya. Ezt azért tesszük, mert egész gondolkodásmódunk „mechanisztikus”, a mechanikából ismert fogalmak rabjai vagyunk. Meglepő módon, ez a mechanisztikus gondolkodásmód bizonyos jelenségek leírásában nagyon sikeres. Mindezen sikerek ellenére, a fény példájából látható, hogy a természet valójában sokkal komplexebb, és ahhoz, hogy bizonyos jelenségeket le tudjunk írni, túl kell lépünk a klasszikus mechanika logikáján. Visszatérve a fény természetére, jelenleg úgy gondoljuk, hogy a fény valójában nem egyszerre részecske és hullám, hanem olyan furcsa objektum, amelynek bizonyos tulajdonságai adott körülmények között leírhatók ezekkel a klasszikus képekkel.

## **1.2 Az elektromágneses hullámokról általában**

Amint említettük, a fény bizonyos tekintetben elektromágneses hullámként jellemezhető. Az elektromágneses hullámot egyszerűen úgy képzelhetjük el, hogy a tér egy adott pontjában periodikusan változó elektromos teret keltünk, például egy rezgő elektromos dipólussal. Ez a változó elektromos tér ugyancsak változó mágneses teret fog maga körül létrehozni, ami a maga rendjén hasonlóan újabb változó elektromos teret indukál. Ilyen módon a keltett perturbáció hullám formájában tovaterjed a térben. Az elektromágneses hullámokat leggyakrabban a rezgés frekvenciája alapján szokták osztályozni. Mivel az elektromágneses hullámok terjedési sebessége a vákuumban frekvenciától függetlenül  $c \approx 3 \cdot 10^8$  m/s, ezt az osztályozást hullámhossz szerint is elvégezhetjük. Végezzük az osztályozást növekvő frekvencia (vagy csökkenő hullámhossz) szerint (lásd 1.1 ábra). A leghosszabb hullámhosszal (legrövidebb frekvenciával) a rádióhullámok rendelkeznek. Ezeken belül beszélhetünk hosszú-, közepes-, rövid-, illetve ultrarövid hullámokról. A rádióhullámok után következnek a mikrohullámok (amint nevük is mutatja, a hullámhossz ebben az esetben mikrométeres nagyságrendű), majd ezután az infravörös (vagy hő-) sugárzások. Az infravörös (a név a vörös fény frekvenciáján aluli frekvenciákra utal) hullámok után a 700–400 nm-es hullámhosszak tartományában a látható fénysugarak találhatók. Ennél nagyobb frekvenciákkal rendelkeznek az ultraibolya-, majd a röntgensugarak. A röntgensugárnál is kisebb hullámhossza (nagyobb frekvenciája) van a gamma sugárzásoknak.



*1.1. ábra: Az elektromágneses sugárzások típusai*

### **1.3 Az elektromágneses hullámok hullámtulajdonságait igazoló kísérletek**

Az elektromágneses hullámok hullámtulajdonságát igazolja a diffrakció és az interferencia jelensége. Diffrakcióról beszélünk például akkor, amikor az elektromágneses hullám egy éles kontúr mellett elhaladva nem vet éles árnyékot a kontúr mögött elhelyezkedő ernyőre, vagy amikor a fény egy résen áthaladva a rés mögötti ernyőn több, különböző intenzitású fénycsíkot hoz létre. Ahhoz, hogy a diffrakció megfigyelhető legyen, az szükséges, hogy az objektum mérete, amelyen a diffrakció történik, közel legyen a fény hullámhosszához. Interferenciáról akkor beszélünk, amikor több fénysugár találkozik egymással, és a fénysugarak fáziskülönbségtől függően erősítik vagy gyengítik egymást. A gyakorlatban a fény interferenciája csak nagy koherenciahosszal rendelkező fénysugarak (pl. lézerek), vagy nagyon kis optikai útkülönbségek esetén figyelhető meg. A fénydiffrakció és fényinterferencia jelensége a fény hullámtermészetére utalnak és a hullámkép keretében magyarázhatók.

### **1.4 Az elektromágneses hullámok részecsketulajdonságaira utaló modern kísérletek**

#### **1.4.1 A feketetest-sugárzás**

Az XX. század kezdetén nagy problémát jelentett a feketetest-sugárzásának elméleti leírása. Mint tudjuk, minden véges hőmérsékleten levő makroszkopikus test elektromágneses sugárzást bocsát ki. Ennek a sugárzásnak

folytonos spektruma van, vagyis a nem nulla termodinamikai hőmérsékletű testek minden frekvencián sugároznak. A sugárzás intenzitása és spektrumának a konkrét alakja függ a test hőmérsékletétől. Gondoljunk például egy vasdarabra, amely vörösen izzik. Ha ezt a vasdarabot tovább melegítjük, akkor fehéren és fényesebben fog izzani, vagyis a sugárzása a hőmérséklet növekedésével megváltoztatja intenzitását, és a hullámhosszak szerinti eloszlását is. A testek hősugárzásának tanulmányozására bevezettek egy modellt, a (tökéletesen) fekete testet. Ez egy olyan test, amely minden ráeső sugárzást elnyel, és minden hullámhosszon sugároz. Ezt a fizikai modellt jól meg lehet közelíteni például egy belül feketére festett dobozzal, amelybe csak egy kis résen keresztül juthat be fény. Ennek a kis résnek a sugárzása jól megközelíti a feketetest-sugárzást, és mérhető a sugárzás spektruma a test hőmérsékletének függvényében. A mért spektrumok elméleti leírására a XIX. század végén és a XX. század elején többfajta elméleti magyarázat született, azonban egyik sem volt minden szempontból kielégítő.

A feketetest folytonos sugárzási spektrumát matematikailag jellemezhetjük az intenzitás-sűrűség eloszlással, amely megadja tetszőleges hullámhossz esetén az egységnyi hullámhossz-intervallumban egységnyi feketetest-felület által egységnyi idő alatt a felületre merőleges irányban kisugárzott energiát:

$$\rho_{\lambda} = \frac{dW}{d\lambda dS dt} . \quad (1.1)$$

A  $\rho_{\lambda}(\lambda)$  függvény integrálja a teljes hullámhossztartományon megadja az egységnyi felület által a felületre merőlegesen kisugárzott teljesítményt. Hogyha az integrálást két tetszőleges hullámhossz között végezzük, akkor megkapjuk az illető hullámhossztartományba kisugárzott teljesítményt. Például  $\lambda_1=400$  nm és  $\lambda_2=750$  nm között integrálva megkapjuk, hogy mekkora teljesítménnyel sugároz a felületre merőleges irányban a feketetest a látható tartományban.

A spektrum kísérleti vizsgálata során több empirikus törvényt is megállapítottak. A *Wien-féle eltolódási törvény* azt mondja ki, hogy egy magasabb hőmérsékleten levő test intenzitás-spektrumának a maximuma eltolódik az alacsonyabb hullámhosszak (magasabb energiák) felé. Ezt az eltolódást matematikailag a:

$$\lambda_{\max} T = konst. \quad (1.2)$$

összefüggés adja, nemzetközi mértékegységekben a Wien-törvényben szereplő konstans értéke:  $konst=2.898 \times 10^{-3}$  K m. A Wien-féle eltolódási törvény megmagyarázza például azt, hogy miért megy át a vörös izzás fehér izzásba a hőmérséklet növelésével. Vörösizzásnál a  $\lambda_{\max}$  a vörösön alul helyezkedik el, és így csak vörös fénynek megfelelő elektromágneses sugárzásokból kapunk nagy

intenzitást, míg magasabb hőmérsékleten a maximum eltolódik az ibolya felé, ezért minden hullámhosszból körülbelül egyforma intenzitású elektromágneses sugárzást észlelünk (fehér fény).

A *Stefan–Boltzmann-törvény* a test hőmérséklete és az összes frekvenciákon egységnyi felület által a felületre merőlegesen kisugárzott teljesítmény között teremt kapcsolatot a Stefan–Boltzmann-állandó ( $\sigma$ ) segítségével:

$$W = \sigma T^4. \quad (1.3)$$

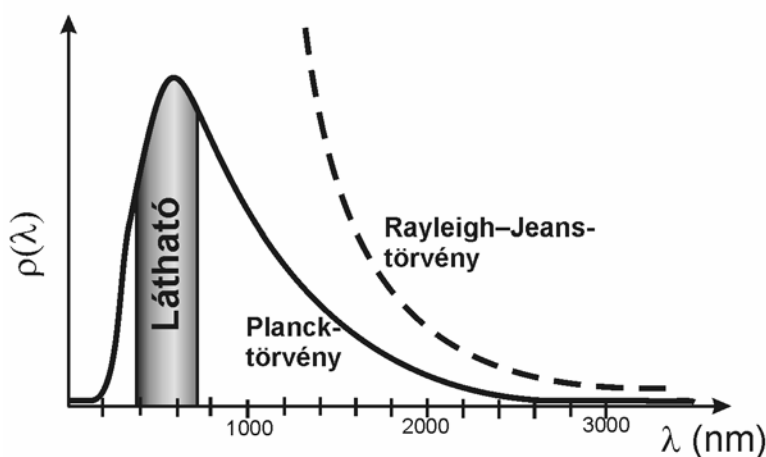
A fenti képletben  $\sigma$  az úgynevezett Stefan–Boltzmann-állandó nemzetközi mértékegységben:  $\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{ J K}^{-4} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ).

A kísérletileg kapott  $\rho_\lambda(\lambda)$  spektrum alakja az 1.2 ábrán látható. Ennek a spektrumnak a kis- és nagyfrekvenciájú viselkedését két különböző elmélettel sikerült leírni. A kis hullámhosszak (nagy frekvenciának felel meg) esetén jól működött a Wien által kidolgozott képlet:

$$\rho_\lambda = \frac{c_1}{\lambda^5} e^{-\frac{c_2}{\lambda T}}, \quad (1.4)$$

a nagy hullámhosszak esetén pedig a *Rayleigh–Jeans-törvény*. Ez utóbbi törvény a kis hullámhosszakon az úgynevezett „ultraibolya-katasztrófához” vezetett. A Rayleigh–Jeans-képlet:

$$\rho_\lambda = \frac{8\pi k T}{\lambda^5}. \quad (1.5)$$



**1.2. ábra:** A feketetest spektrumának intenzitás-sűrűség eloszlásfüggvénye. A Planck-képlet helyesen írja le a kísérletileg mért eloszlást, a Rayleigh–Jeans-képlet „ultraibolya katasztrófához” vezet

A feketetest-sugárzás teljes spektrumának a leírását Planck adta meg, de elméletében azzal a feltételezéssel kellett élnie, hogy a hősugárzó test  $E = h\nu$  kvantumokban (diszkrét energiacsomagokban) sugároz, ahol  $\nu$  a frekvencia és  $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$  J·s egy állandó, az ún. Planck-állandó. Ezzel a feltételezéssel Planck elméletileg tökéletes leírását adta a feketetest-sugárzás spektrumának. Planck elmélete alapján:

$$\rho_{\lambda} = \frac{c_1}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{c_2}{\lambda T}} - 1}. \quad (1.6)$$

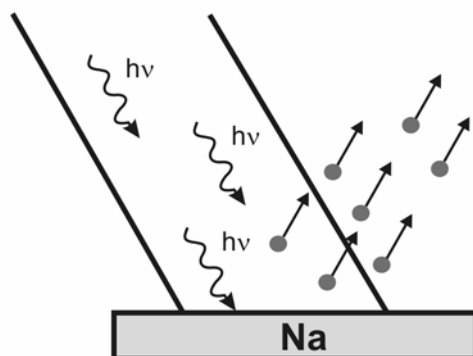
A Planck által erőltetetten bevezetett kvantumfeltétel indította el végül is a kvantummechanika fejlődését. Planck kvantumhipotézise (vagyis az, hogy a hőmérsékleti sugárzás esetén az energia kibocsátása nem folytonosan, hanem kvantumosan történik) ellentétben állt a klasszikus fizika minden tapasztalatával, és ezért még Planck számára is sok ideig elfogadhatatlannak tűnt. Később azonban számtalan más kísérlet során is bebizonyosodott, hogy a mikrovilág szintjén a klasszikus fizika tapasztalataira nem építhetünk, és a Planck által bevezetett hipotézis sok más jelenség esetében is bebizonyosodott.

### 1.4.2 A fényelektromos hatás

A fényelektromos hatás aránylag egyszerű jelenség. Ha egy fémfelületet fénnel megvilágítanak, a fémfelületből a megvilágítás hatására elektronok lépnek ki (1.3 ábra). A fényelektromos hatás során több olyan érdekes ténnyel szembesülünk, amely arra utal, hogy nem fogadhatjuk el, hogy a fénynek pusztán hullámtermészete lenne.

1. A fényelektromos hatás a fény bekapcsolásakor azonnal jelentkezik. A fény tiszta hullámtermészete alapján azonban a fémbe levő elektronoknak időre van szükségük ahhoz, hogy a beeső fényhullámból összegyűjtsék a fémbe való kilépéshez szükséges energiát.
2. A fény intenzitását növelve a kilépő elektronok száma növekszik, de nem nő a maximális kinetikus energiájuk.
3. Létezik egy küszöbfrekvencia a fényre, ami alatt adott fém esetén nem lehet fényelektromos hatást előidézni (például vörös fénnel megvilágítva a fémfelületet nem észlelték a jelenséget). Hogyha a fényt az elektronok mint hullámot nyelik el, akkor egy idő után még az alacsonyabb energiájú (alacsonyabb frekvenciájú) sugárzás is ki kellene hogy váltsa a jelenséget. A kísérletekből azonban nyilvánvaló volt, hogy ez nem így történik.

4. Nagyon kis intenzitású ultraibolya sugárzást használva kevesebb elektron lép ki a felületről, de ezeknek az elektronoknak nagyobb mozgási energiájuk lesz, mintha nagyobb intenzitású, de kisebb frekvenciájú (pl. zöld) sugárzást használnánk. Tehát a kilépő elektronok mozgási energiáját a beeső fény frekvenciája, nem pedig az intenzitása határozza meg.



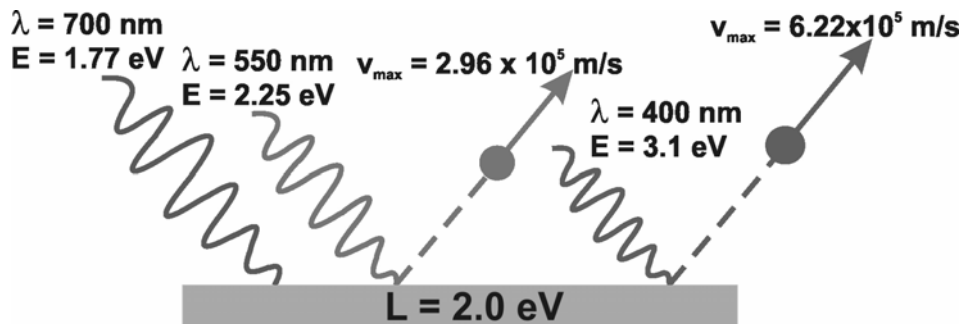
**1.3. ábra:** Fényelektromos hatás: a vákuumban tartott fémfelületet egy bizonyos küszöbfrekvencia feletti fénysugárral megvilágítva, a felületről elektronok lépnek ki

Ezeket a megfigyeléseket nem lehetett pusztán a fény hullámtermészete alapján magyarázni. A magyarázatot végül is Albert Einstein találta meg, és 1905-ben publikálta is. Einstein továbbfejlesztette Planck ötletét, amely szerint az elektromágneses sugárzás kibocsátása és elnyelése kvantumokban történik. Ezt az energiakvantumot fotonnak nevezték el. A fotonok megőrzik a kvantumos jellegüket a kibocsátás és az elnyelés között is, és ezáltal a fénysugarak nem folytonosan, hanem kvantumokban szállítják az energiát. Einstein ezért az elméletért kapta meg 1921-ben a Nobel-díjat. Einstein elmélete alapján a fény diszkrét „részecskékben”, ún. fotonokban szállítja az energiát. Egy foton energiája:

$$\varepsilon = h\nu, \quad (1.7)$$

ahol  $h$  a Planck-állandó,  $\nu$  pedig a foton frekvenciája. A fémfelületre beeső foton ütközik egy elektronnal, ezáltal átadja neki az energiáját. Ennek az energiának egy része arra fordítódik, hogy az elektron kilépjen a fémből ( $L$ ), a maradék energia pedig az elektron mozgási energiájaként jelentkezik ( $E_m$ ):

$$\varepsilon = L + E_m. \quad (1.8)$$



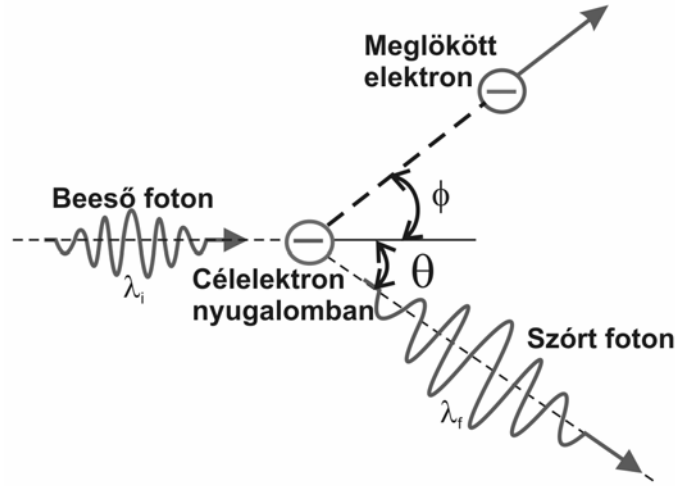
**1.4. ábra:** Fényelektromos hatás kálium felület esetén

Ez az egyszerű kvantumhipotézis gyönyörűen megmagyarázza a fényelektromos hatással kapcsolatos megfigyeléseket:

1. Ahogy az első foton eléri a felületet, megkezdődik az elektronok kilépése.
2. Mivel nagyon kicsi annak a jelenségnek a valószínűsége, hogy egy elektron a fémbe több mint egy fotonnal ütközzék és így több fotonból gyűjtse össze az energiát, a fotonfluxus növelésével csak a kilépő elektronok száma növekedik, az energiájuk nem.
3. Ha a fotonok energiája kisebb, mint a kilépési munka ( $L$ ), akkor az elektronok nem tudnak kilépni a fémről.
4. A kilépő elektronok energiáját a beeső sugárzás fotonjainak az energiája fogja megszabni, nem pedig az, hogy mennyi foton érkezik a felületre.

### 1.4.3 A Compton-szórás

A Compton-szórás az a jelenség, amelynek során a fény (fotonok sokasága) elektronokon szóródik, és a szóródás során energiájának egy részét átadja az elektronoknak. A foton energiájának változását úgy érzékeljük, hogy a sugárzás hullámhossza megváltozik. Ezt a szóródást bármilyen hullámhosszú elektromágneses sugárzás létrehozhatja, de először Röntgen- (X-) sugarak esetén észlelték. Ennek oka az, hogy a Compton-szórás esetén a hullámhossz változása független a hullámhossztól, azaz ugyanakkora a változás akár látható fényről, akár röntgensugárzásról beszélünk. Mivel a látható fény hullámhossza sokkal nagyobb, mint a röntgensugárzás hullámhossza, ezért a relatív hullámhossz-változás röntgensugarak esetén nagyobb, és így a változás könnyebben érzékelhető.



1.5. ábra: Compton-szórás

Elfogadva tehát, hogy a fény  $\varepsilon = h\nu$  energiájú fotonok által szállítja az energiát, a szórási folyamatra felírhatjuk az energiamegmaradást relativisztikus alakban:

$$h\nu_i + m_e c^2 = h\nu_f + \sqrt{p_e^2 c^2 + m_e^2 c^4}, \quad (1.9)$$

ahol  $m_e$  az elektron tömege,  $p_e$  az elektron impulzusa,  $\nu_i$  és  $\nu_f$  a foton kezdeti, illetve végső frekvenciája. A szórási folyamatra igaz kell hogy legyen ugyanakkor az impulzusmegmaradás törvénye is (lásd 1.5 ábra):

$$\vec{p}_i = \vec{p}_f + \vec{p}_e, \quad (1.10)$$

aminek alapján:

$$p_e^2 = (\vec{p}_i - \vec{p}_f) \cdot (\vec{p}_i - \vec{p}_f) = p_i^2 + p_f^2 - 2p_i p_f \cos \theta. \quad (1.11)$$

A fenti (1.11) képletet átírva hullámhosszokra a Planck-képlet alkalmazásával ( $p = h/\lambda$  és  $pc = h\nu$ ) kapjuk, hogy:

$$(p_e c)^2 = (h\nu_i)^2 + (h\nu_f)^2 - 2h^2 \nu_i \nu_f \cos \theta. \quad (1.12)$$

Ugyanezt a mennyiséget kifejezve az energiamegmaradásból:

$$(p_e c)^2 = (h\nu_i)^2 + (h\nu_f)^2 - 2h^2 \nu_i \nu_f + 2m_e c^2 (h\nu_i - h\nu_f), \quad (1.13)$$

és kivonva (1.12)-ből azonnal adódik:

$$-2h^2 \nu_i \nu_f \cos \theta = -2h^2 \nu_i \nu_f + 2m_e c^2 (h\nu_i - h\nu_f). \quad (1.14)$$

A fenti képletet átrendezve és a hullámhosszra felírva:

$$\frac{1}{h\nu_f} - \frac{1}{h\nu_i} = \frac{1}{m_e c^2} (1 - \cos \theta), \quad (1.15)$$

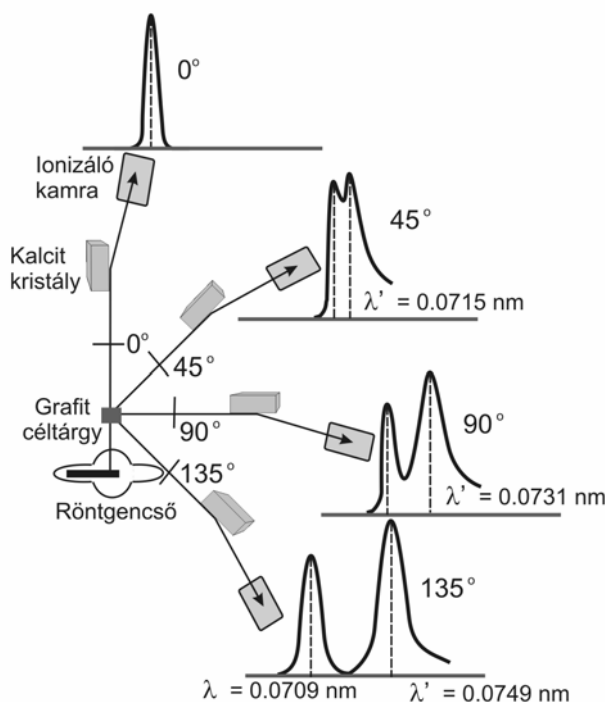
ami elvezet az effektust leíró végső képlethez:

$$\lambda_f - \lambda_i = \Delta\lambda = \Lambda(1 - \cos \theta). \quad (1.16)$$

A fenti képletben  $\Lambda = h/(m_e c) = 2.4 \cdot 10^{-12}$  m, a jelenségre jellemző állandó.

A Compton-szórás következtében megjelenik tehát egy nagyobb hullámhosszú sugárzás is, amelynek a hullámhossza függ a szórási szögtől (1.6 ábra). A szögfüggésre levezetett képlet jó egyezést mutat a kísérleti adatokkal.

A szórás elméleti tárgyalása során a fotont mint részecskét kezeltük, és a kísérleti adatokkal jól egyező eredményeket kaptunk. A Compton-szórás egy olyan kísérlet tehát, amely, a fényelektromos hatástól függetlenül, kísérleti bizonyítékot szolgáltat a „fényrészecske”, azaz a foton létezésére. Ez a kísérlet volt az, amely az 1920-as években véglegesen eldöntötte a fény (akkor még nagyon vitatott) részecske jellegének a helyességét. Ezen jelenség felfedezéséért Arthur Holly Compton 1927-ben Nobel-díjat kapott.



**1.6. ábra:** A Compton-szórás következtében megjelenik egy nagyobb hullámhosszú sugárzás is, amelynek a hullámhossza függ a szórási szögtől

## 1.5 Kvantumos (nem folytonos) viselkedés atomi szinten

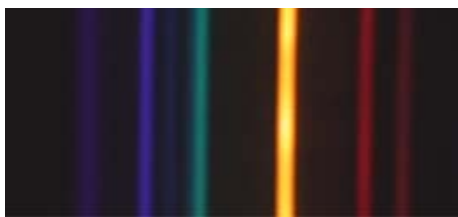
### 1.5.1 Diszkrét atomi spektrumok. A hidrogén atomi spektruma

Amikor egy kémiai elem fényt bocsát ki vagy fényt nyel el, ez mindig jól meghatározott frekvenciákon történik. A hőmérsékleti sugárzástól eltérően itt a sugárzási frekvenciák spektruma nem folytonos, hanem diszkrét vonalakkól áll. Fontos észrevétel, hogy a kibocsátási és elnyelési vonalak spektruma általában

megegyezik. A diszkrét frekvenciák (vagy spektrumvonalak) sokasága elemenként más és más, és ezek alapján azonosítani lehet, hogy milyen elemről is van szó (Kirchoff, 1859). Jól ismert gyakorlati példa erre a hélium felfedezése: 1868-ban J. Norman Lockyer (a Nature folyóirat alapítója) a Nap folytonos spektrumában olyan diszkrét spektrumvonalakat (fekete vonalak, elnyelési spektrum) fedezett fel, amelyek addig ismeretlenek voltak. Feltételezte, hogy amit talált, az egy új elem elnyelési spektruma, ezt az új elemet a görög napistenségről (Helios) héliumnak nevezte el. A héliumot később megtalálták a Föld légkörében is.

A diszkrét spektrumvonalak létezése ismét egy olyan jelenséggel szembesít bennünket, amelynek során egy mennyiség (jelen esetben a sugárzás frekvenciája vagy energiája) nem folytonosan változik, hanem csak jól meghatározott diszkrét értékeket vehet fel, más szóval kvantált. Később majd meglátjuk, hogy a frekvencia-quantálás abból ered, hogy az atom energiaszintjei kvantáltak. Amikor egy atom energiát nyel el vagy sugároz ki, ezt csak úgy teheti, hogy energiája a kvantált energiaszintek között változik. A kisugárzott energia, ami a kvantált energiaszintek energiáinak a különbsége, ezáltal szintén kvantált lesz.

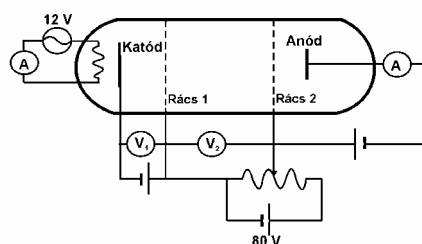
A tudósok számára a spektrumok elméleti leírása komoly kihívást jelentett, és a korai kvantummechanika egyik nagy sikere a legegyszerűbb elem, a hidrogén spektrumának az elméleti megmagyarázása volt (Niels Bohr, Nobel-díj 1922-ben).



*1.7. ábra: A hélium emissziós spektruma*

### 1.5.2 A Franck–Hertz-kísérlet

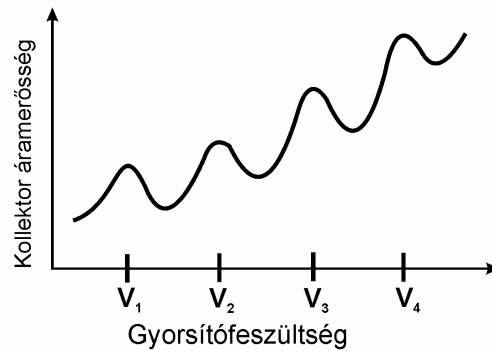
James Franck és Gustaw Ludwig Hertz híres kísérletét 1914-ben végezte el azzal a céllal, hogy megvizsgálják, az atomokban valóban diszkrét energiaszintek találhatók-e. A kísérlet során elektronokat gyorsítanak egy elektroncsőben (1.8 ábra).



**1.8. ábra:** A Franck–Hertz-kísérlethez használt berendezés

Az elektronok a katódtól indulva gyorsuló mozgást végeznek az anód felé. A kísérleti csőben alacsony nyomású higanygőz található. Az elektronok a mozgásuk során kétféleképpen ütközhetnek a Hg-atomokkal: vagy rugalmas ütközést szenvednek, és ilyenkor nem változik meg a mozgási energiájuk, vagy, ha kellően nagy mozgási energiával rendelkeznek az ütközés előtt, akkor az ütközés folyamán gerjeszthetik a Hg-atomot az alapállapotból az első gerjesztett állapotba. A gerjesztés során az elektronok energiája bizonyos, jól meghatározott értékkel csökken. A kísérlet során a 2. rács és az anód közé egy lassító feszültséget kapcsolnak, ezért csak az elég nagy mozgási energiával rendelkező elektronok juthatnak el az anódig. A katód és az 1. rács közti gyorsítófeszültséget változtatva, az anód és a 2. rács között mérhető áramerősséget vizsgálják. A kísérletet elvégezve az 1.9. ábrán látható karakterisztikához jutunk.

Növelve a gyorsítófeszültséget, az anódra beérkező áram eleinte monotonon növekszik. Amikor az elektronok a csővön áthaladva annyi energiára tesznek szert, hogy képesek gerjeszteni a Hg-atomokat, akkor elkezdnek rugalmatlanul ütközni a Hg-atomokkal. A rugalmatlan ütközések következtében elveszítik mozgási energiájukat, és így nem érik el az anódot, tehát csökken a mért áramerősség. Ez az első minimum az 1.9. ábrán. A következő minimum olyan gyorsítófeszültség-értékre következik be, amikor az elektronok akkora energiára tesznek szert, hogy egymás után kétszer gerjesztenek egy-egy Hg-atomot. A többi minimumnak is hasonló értelmezése van, több Hg-atom egymásutáni gerjesztésének felelnek meg. A minimumok közötti gyorsítófeszültség-különbség állandó, és a gyorsított elektron energiája megegyezik a Hg-atom első gerjesztési energiájával.



**1.9. ábra:** A Franck–Hertz-kísérlet eredménye

A kísérlet direkt módon bizonyítja, hogy az atomok egyszerre csak jól meghatározott energiamennyiséget nyelhetnek el, vagyis a gerjesztési energiájuk kvantált.

## 1.6 Javasolt feladatok

1.1 a) A Planck-képletből kiindulva vezessük le a Wien-féle eltolódási törvényt, illetve a Stefan–Boltzmann-törvényt. b) Igazoljuk, hogy nagyon nagy illetve nagyon kis hullámhosszak esetén a Planck-képletből visszakapható a Wien- és a Rayleigh–Jeans-törvény. c) Becsüljük fel, milyen hőmérsékleten van a vörösén, illetve a fehérén izzó vasdarab.

1.2. Egy katódcső egyik végén a kálium anódfelületet monokromatikus fénnyel világítjuk meg. a) Számítsuk ki a belépő fény frekvenciájának a függvényében, hogy mekkora fékező feszültséget kell kapcsolni a csőre ( $U_{max}$ ) ahhoz, hogy egyetlen elektron se érje el az anódot. Ábrázoljuk ezt a mennyiséget a belépő fény frekvenciájának a függvényében a látható fény tartományában. b) Megfordítva az anód és a katód szerepét (vagyis egy  $U_0$  gyorsítófeszültséget kapcsolva a kilépő elektronokra), ábrázoljuk az anódra érkező elektronok energiáját a belépő fény frekvenciájának a függvényében.

1.3. Becsüljük fel, hogy egy 100 W-os villanykörte hány fotont bocsát ki másodpercenként a látható tartományban.

1.4. Az 1.9 ábra alapján rajzoljuk meg azt az ábrát, amely az elektrononkénti gerjesztések számát adja meg a gyorsítófeszültség függvényében (tudjuk, hogy az egy gerjesztéshez szükséges energia  $E = 4.9 \text{ eV}$ ). Az ábra a 0–20 V tartományon legyen megrajzolva. Mi történne akkor, ha a gerjesztéshez szükséges energia ennek az értéknek a másfélszerese, illetve a kétharmada volna?

## 2. FEJEZET

### Korai kvantummechanika

A következőkben olyan kezdeti elméleti próbálkozásokat ismertetünk, amelyek az előző fejezetben vázolt kísérleti tényeket aránylag egyszerűen, klasszikus mechanikai gondolkodásmódot alkalmazva magyarázzák. Ezeknek az elméleteknek a megalapozása nem teljesen ellentmondásmentes, furcsán ötvözik a klasszikus és kvantummechanikai gondolkodásmódot. Tudománytörténeti szempontból és a precíz kvantummechanikai logika fele vezető út kialakításában mégis mérföldkövet jelentenek.

#### 2.1 A Bohr-modell

Ernest Rutherford kísérletei nyomán világossá vált, hogy az atom pozitív töltése nagyon kis térfogatba, az atommagba van összesűrítve. Rutherford atommodellje szerint (melyet bolygómodell néven ismerünk) a pozitív töltésű atommag körül keringenek a negatív töltésű elektronok. A modell egyik azonnali hibája az, hogy a klasszikus elektrodinamika törvényei szerint egy körpályán mozgó (azaz gyorsuló mozgást végző) töltésnek elektromágneses sugárzást kellene kibocsátania. A bolygómodell elektronja ezek értelmében kisugározná az energiáját, és hamar belezuhanna a magba. Kísérletileg azonban ilyent nem észlelünk, az atomok külső hatás nélkül nem sugároznak, és stabilan megmaradnak az alapállapotukban. A modell másik nagy problémája az, hogy nem volt képes megmagyarázni az atomon belüli diszkrét energiaszintek létét, amit számos korábban említett kísérlet igazolt. A bolygómodell továbbfejlesztésére és a fenti hiányosságok kiküszöbölésére Niels Bohr 1913-ban egy újabb atommodellt javasolt.

##### 2.1.1 A Bohr-féle kvantumhipotézis

Bohr a bolygómodell hiányosságait úgy oldotta meg, hogy új, extrapoztulatúkat vezetett be.

1. posztulátum: Az atommag körül keringő elektron pályájának sugara nem lehet tetszőleges (ez intuitíve abból is következik, hogy a H-atomok mind egyforma méretűek). A bolygók tetszőleges távolságra keringhetnek a Nap körül, az elektronok azonban nem lehetnek tetszőleges távolságra az atommagtól.

2. posztulátum: A megengedett pályákon az atommag körül keringő elektron nem sugároz. A posztulátum nem foglalkozik azzal, hogy miért.

3. posztulátum: Amikor az atom sugároz, az elektron átugrik az egyik megengedett pályáról a másikra, a kibocsátott foton energiája pedig a pályákhoz tartozó energiák különbsége:

$$E_{\text{foton}} = E_f - E_i = h\nu \quad (2.1)$$

4. posztulátum: Bohr kvantálási feltétele: a megengedett pályákon keringő elektronok impulzusnyomatékának a modulusza,  $L$ , a következő szabály szerint kvantált:

$$L = n\hbar = n \frac{h}{2\pi}, \text{ vagy } pr = n\hbar, \quad (2.2)$$

ahol  $n$  egy nullától különböző természetes szám,  $h$  a Planck-állandó,  $p$  az impulzus modulusza,  $r$  a pályasugár.

## 2.1.2 A Bohr-modell levezetése

A Bohr-modellben egy fontos, meg nem indokolt kvantálást vezettünk be, amely az elektron impulzusnyomatékára vonatkozott. Ez a kvantálási feltétel nemcsak az impulzusnyomatékot fogja kvantálni, hanem az elektron pályájának a sugarát és az energiának az értékét is.

Az elektron kinetikus és potenciális energiája felírható úgy, mint

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2; \\ E_p = k \frac{q_1 q_2}{r} = -k \frac{e^2}{r}; \quad k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}, \quad (2.3)$$

ahol  $v$  az elektron sebességét,  $m$  az elektron tömegét jelöli,  $\epsilon_0$  pedig a légüres tér permittivitása. Az elektron összenergiája:

$$E = E_k + E_p = \frac{1}{2}mv^2 - k \frac{e^2}{r}. \quad (2.4)$$

A klasszikus mechanika alapján a körmozgáshoz szükséges centripetális erőt a Coulomb-erő szolgáltatja:

$$k \frac{e^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r} \Rightarrow \frac{1}{2}mv^2 = k \frac{e^2}{2r}; \\ E = -k \frac{e^2}{2r}. \quad (2.5)$$

A kvantálási feltételből azonban

$$mvr = n \frac{h}{2\pi} \Rightarrow v^2 = n^2 \frac{\hbar^2}{m^2 r^2}, \quad (2.6)$$

ugyanakkor (2.5) szerint:

$$v^2 = \frac{ke^2}{mr} = n^2 \frac{\hbar^2}{m^2 r^2} \Rightarrow r_n = \frac{\hbar^2}{mke^2} n^2 = a_0 n^2. \quad (2.7)$$

A (2.7) képlet megadja tehát az elektron lehetséges sebességeit és a megengedett pályasugarakat. A fenti képletben  $a_0$  a Bohr-sugár,  $n$  pedig egy nullától különböző természetes szám:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{mke^2} \cong 0.053 \text{ nm}. \quad (2.8)$$

Azonnal megkaphatók a megengedett pályáknak megfelelő energiaértékek is:

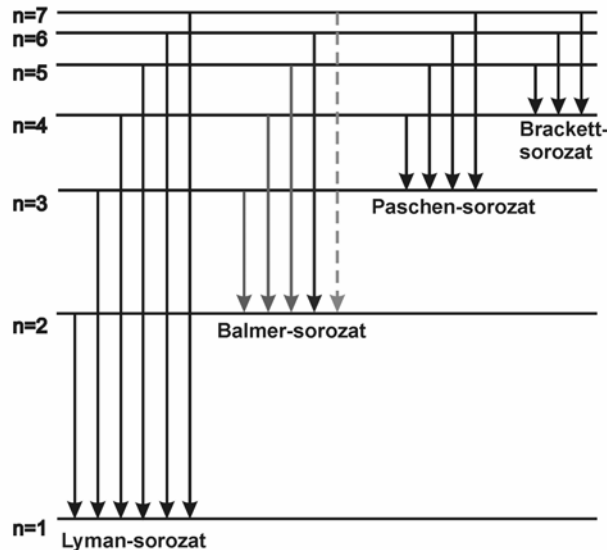
$$E_n = -\frac{mk^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -13.6 \frac{1}{n^2} \text{ eV}. \quad (2.9)$$

### 2.1.3 A Bohr-modell eredményei. A hidrogénatom spektruma

Az előbb kiszámított energiaszinteket figyelembe véve, az  $n_f$  (végső) és  $n_i$  (kezdeti) kvantumszámokkal jellemzett energiaszintek közötti különbségek szolgáltatják a kibocsátható fotonok energiáit, és ezáltal meghatározzák a spektrumban fellelhető frekvenciákat.

$$\begin{aligned} h\nu &= \frac{hc}{\lambda} = E_f - E_i = -\frac{mk^2 e^4}{2\hbar^2} \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{1}{\lambda} &= -\frac{mk^2 e^4}{4\pi c \hbar^3} \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) = -R_H \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), \end{aligned} \quad (2.10)$$

ahol  $R_H = 1.097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$  a Rydberg-állandót jelöli. Ez a képlet jól visszaadja a hidrogén megfigyelt spektrumvonalait. A különböző  $n_f$ -ek szerint csoportosítva:  $n_f = 1$ -re visszkapjuk a kísérletileg ismert Lyman-sorozatot (UV tartomány),  $n_f = 2$ -re a Balmer-sorozatot (látható fény) és  $n_f = 3$ -ra pedig a Paschen-sorozatot (IR tartomány) (2.1 ábra).



**2.1.ábra:** A hidrogén spektrumvonalai

Számos fontos eredménye mellett a Bohr-modellnek azonban sok lényeges elvi hiányossága van. A Bohr-modell elég primitíven ötvözi a kvantumos és klasszikus gondolkodásmódot. Nem ad magyarázatot a bevezetett impulzusnyomaték kvantálási feltételére, és nem magyarázza meg, hogy a Bohr-pályákon a körmozgást végző elektron miért nem sugároz elektromágneses hullámot. A modell keretében nem világos az sem, hogyan lehet a többelektronos atomok esetét tanulmányozni és a sugárzási spektrumukat leírni.

## 2.2 A Bohr–Sommerfeld-féle kvantálás

Sommerfeld általánosította Bohr kvantálási feltételét, és kiterjesztette arra az esetre, amikor az elektron mozgására nemcsak körpályák, hanem ellipszis alakú pályák is lehetségesek (klasszikus analógia: tudjuk, hogy a bolygómozgásra az ellipszispályák is megoldások). Ebben az esetben a kvantálási feltétel (feltételek):

$$\oint p_i dr_i = n_i \hbar, \quad (2.11)$$

ahol  $p_i$  az általánosított impulzus komponenseit,  $r_i$  pedig a hozzá tartozó általánosított koordinátákat jelöli. Az  $n_i$  természetes számokat jelöl, az integrál pedig egy zárt pályára vonatkozik. Ellipszispálya esetén, kétdimenzióban ez a kvantálási feltétel a következő két feltétellel ekvivalens:

$$\oint p_r dr = n_r \hbar \quad (2.12)$$

$$\oint p_g d\mathcal{G} = n_g h \quad (2.13)$$

A fenti két képletben  $r$  és  $\mathcal{G}$  a síkbeli polárkoordinátákat jelöli. Azonnal belátható, hogy  $p_g$  nem más, mint az elektron  $L$  impulzusnyomatéka (ami állandó), és így a (2.12) kvantálási feltétel a Bohr-féle (2.2) kvantumfeltétellel ekvivalens. A feladatban most két kvantumszám van, melyeknek az összegét főkvantumszámnak nevezzük:

$$n = n_r + n_g. \quad (2.14)$$

Kimutatható, hogy ezen általánosított kvantálás esetén az összenergia hasonló képlettel írható fel, mint a Bohr-modellben, azonban ekkor a lehetséges energiaszintek értékei az  $n$  főkvantumszám értékétől függenek, vagyis mind az  $n_r$  radiális, mind az  $n_g$  orbitális kvantumszámnak a függvényei:

$$E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2} \frac{1}{2n^2}. \quad (2.15)$$

Külső elektromos és mágneses tér hiányában a (2.12)–(2.13) Bohr–Sommerfeld-féle kvantálás hidrogénatom esetén ugyanazokat az energiaszinteket szolgáltatja, mint a Bohr-modell. A Bohr–Sommerfeld-modell előrelépést jelentett olyan szempontból, hogy kiderült: adott energiaállapothoz több különböző kvantumszámmal jellemzett állapot tartozik. Az ilyen energiaszinteket elfajult szinteknek nevezzük. Ha a hidrogénatom elektronjára a centrális Coulomb-erőn kívül más külső erő is hat (pl. mágneses erő, elektromos erő), akkor a lehetséges állapotok energiái nemcsak az  $n$  kvantumszám értékétől fognak függni, hanem az  $n_g$  orbitális kvantumszám értékétől is. Ilyen esetben azt mondjuk, hogy az energiaszintek felhasadnak, és az elfajulás részben feloldódik. Ezzel a modellel magyarázni lehetett az akkoriban már ismert Zeeman-hatást, ami a különböző mágneses kvantumszámmal jellemzett szintek felhasadását jelenti külső mágneses tér jelenlétében.

A Bohr–Sommerfeld-féle kvantálás elvégezhető relativisztikus korrekciók figyelembevételével is. A lehetséges energiaszintekre azt kapjuk, hogy az elfajulás megszűnik, és az  $n$  főkvantumszámmal jellemzett elfajult energiaszintek az  $n_g$  értékének függvényében egymáshoz közel eső szintekre hasadnak fel:

$$E_{nn_g} = E_n \left( 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left( \frac{n}{n_g} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right), \text{ ahol} \quad (2.16)$$

$$\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (2.17)$$

a finomszerkezeti állandó.

Ezáltal lehetővé vált a Bohr–Sommerfeld-modell segítségével a precíz spektroszkópai módszerekkel felfedezett *finomszerkezet* magyarázata. (A hidrogén finomszerkezetén azt értjük, hogy a H spektruma egymáshoz nagyon közel levő színekpvonalak sokaságából áll.)

## 2.3 De Broglie kvantumhipotézise

Luis de Broglie francia fizikus 1924-ben a doktori értekezésében a fény részecske-hullám kettős természetét általánosította. Azt vizsgálta, hogy milyen következményekkel járna, ha ezt az elvet kiterjesztenénk más elemi részecskékre is. Mi lenne, ha azt feltételeznénk, hogy nemcsak a fotonnak van részecske- és hullámjellege, hanem az elektronnak és minden más ismert részecskének is? A fényre levezetett összefüggés általánosításával egy hullámhosszt lehet minden mozgó részecskéhez hozzárendelni. A fotonokra felírható, hogy

$$mc^2 = h\nu \text{ vagy } p = \frac{1}{c}\sqrt{m^2c^4} = \frac{mc^2}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \Rightarrow$$

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (2.18)$$

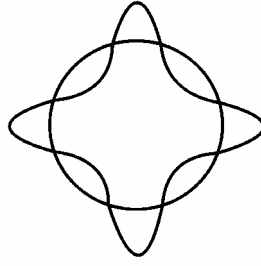
ahol  $m$  a foton mozgási tömege és  $p$  a foton impulzusa. A hullámvektort bevezetve, amelynek iránya és irányítása megegyezik a részecske mozgásának irányával és irányításával:

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}; \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (2.19)$$

A fenti két összefüggés elvileg általánosítható bármely olyan részecskére, amely  $p$  impulzussal rendelkezik. Ezáltal a természet minden részecskéjéhez hozzárendelhetünk egy  $\lambda$  hullámhosszú hullámot. De Broglie hipotézise nagyon merésznek tűnhet, azonban ezt igazolni lehetett, és kísérletileg sikerült diffrakciót és interferenciát létrehozni elektronsugarakkal. De Broglie „az elektron hullámtermészetének felfedezéséért” 1929-ben Nobel-díjat kapott, és merész hipotézise megindította a kvantummechanika gyors fejlődését.

A de Broglie-hullámhosszal azonnal magyarázhatóvá vált az eddig meglehetősen önkényesen bevezetett Bohr-féle kvantálási feltétel: a magkörüli pályákon az elektron úgy akar mozogni, hogy a pálya mentén állóhullámot alakítson ki, vagyis egész számú hullámhosszal fedje le a zárt pályát (lásd a 2.2 ábrát). Ezt a feltételt matematikai alakban felírva pontosan a Bohr-féle kvantálási feltételt kapjuk:

$$2\pi r = n\lambda = n \frac{h}{p} \Rightarrow pr = n\hbar. \quad (2.20)$$



**2.2. ábra:** Bohr kvantálási feltétele a de Broglie-hullámhossz alapján

## 2.4 A részecskékhez rendelt síkhullámok egyenlete

De Broglie hipotézise alapján minden részecskéhez (pl. elektronhoz is) rendelhetnénk egy hullámot. Az egyszerűség kedvéért azt tételezték fel először, hogy a szabadon mozgó részecskékhez síkhullámot rendelünk. Tételezzük fel, hogy egy szabad részecske az  $x$  tengely irányában konstans sebességgel mozog, és rendeljük hozzá az  $x$  tengely irányában terjedő síkhullámot. Einstein és de Broglie alapján:

$$E = \omega\hbar = \hbar\nu \text{ és } p = \frac{\hbar\nu}{c} = \frac{\hbar}{\lambda}, \quad (2.21)$$

ahol  $E$  a részecske mozgási energiája,  $p$  az impulzusa,  $\lambda$  a részecskéhez rendelt hullám hullámhossza,  $\nu$  a frekvenciája,  $\omega$  pedig a körfrekvenciája.

Egy síkhullám általános egyenlete:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= A \cos(\omega t - x \cdot 2\pi / \lambda + \varphi_0) = A \cdot \cos(\omega t - kx + \varphi_0) = \\ &= A [\cos(\omega t - kx) + \delta \sin(\omega t - kx)] \end{aligned} \quad (2.22)$$

Mivel ez a hullámfüggvény a szabadon mozgó részecskék időbeli és térbeli translációs invarianciáját kell hogy tükrözze, bebizonyítható, hogy a  $\psi(x, t)$  hullámfüggvény komplex kell hogy legyen (nem lehet tisztán valós).

Bizonyítás: A hullámfüggvény alakjának az invarianciája az  $x$  és  $t$  koordináták kezdőpontjának megválasztására vonatkozóan (transzlációs invariancia) azt feltételezi, hogy a

$$\begin{aligned} \cos(kx - \omega t + \varepsilon) + \delta \sin(kx - \omega t + \varepsilon) &= \\ &= A(\varepsilon) [\cos(kx - \omega t) + \delta \sin(kx - \omega t)] \end{aligned} \quad (2.23)$$

egyenlőség igaz kell legyen minden  $\varepsilon$  értékre. Az egyenletből az következik, hogy

$$\delta = \frac{-\sin(\varepsilon) + \delta \cos(\varepsilon)}{\cos(\varepsilon) + \delta \sin(\varepsilon)} = \frac{\delta - \tan(\varepsilon)}{1 + \delta \tan(\varepsilon)}, \quad (2.24)$$

ami szintén minden  $\varepsilon$  értékre igaz kell legyen. A fenti egyenletről azonnal kapjuk, hogy:

$$\delta^2 = -1. \quad (2.25)$$

A fentiek alapján a részecskéhez tehát egy komplex síkhullámot kell rendelnünk:

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} = Ae^{\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})}. \quad (2.26)$$

Ezzel a síkhullámmal kapcsolatban azonban több probléma is felmerül:

1) Az amplitúdója az egész térben ugyanaz, vagyis ez a hullám nem lokalizált. Az elektron pedig lokalizált objektum, legalábbis bizonyos mértékben tudjuk róla, hogy hol található a térben.

2) Ha kiszámítjuk ennek a hullámnak a terjedési sebességét (fázissebeségét), ez sajnos nem fog megegyezni az elektron terjedési sebességével:

$$\omega t - kx = 0 \Rightarrow x = \frac{\omega t}{k} = \frac{E}{p}t = \frac{mv^2/2}{mv}t = \frac{v}{2}t \neq vt \quad (2.27)$$

Ezen elégtelenségek feloldása végett de Broglie javaslata az volt, hogy az elektront a síkhullám helyett egy hullámcsoaggal írjuk le. A hullámcsoagot meg lehet szerkeszteni több síkhullám szuperpozíciójaként (összegeként), amelyeknek a hullámvektorai egy adott  $[k_0 - \Delta k, k_0 + \Delta k]$  intervallumban vannak. Ezeket a síkhullámokat különböző  $c(k)$  súlyfaktorkkal vesszük be az új hullámfüggvénybe:

$$\Psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} c(k) \Psi_k(x, t) dk = A \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} c(k) e^{i(\omega t - kx)} dk \quad (2.28)$$

Bevezetünk  $k$  helyett egy  $\xi$  változót, és feltételezzük hogy  $\omega$  csak nagyon kis mértékben függ  $k$  értékétől:

$$\xi = k - k_0, \quad \xi \in [-\Delta k, \Delta k], \quad d\xi = dk \quad (2.29)$$

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k_0} (k - k_0)^2 + \dots \quad (2.30)$$

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} \xi + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k_0} \xi^2 + \dots$$

Tételezzük fel ugyanakkor, hogy minden síkhullám egyforma valószínűséggel van jelen a hullámcsoagban:

$$c(k) = c(k_0) = \frac{1}{2\Delta k} \quad (2.31)$$

Az  $\omega(k)$  kifejtésében elhanyagolva a  $\xi^2$ -es és magasabb rendű tagokat, azonnal adódnak a következő egyenletek:

$$\Psi(x,t) = Ac(k_0)e^{i(\omega_0 t - k_0 x)} \int_{-\Delta k}^{+\Delta k} e^{i\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} (t-x)\xi} d\xi \quad (2.32)$$

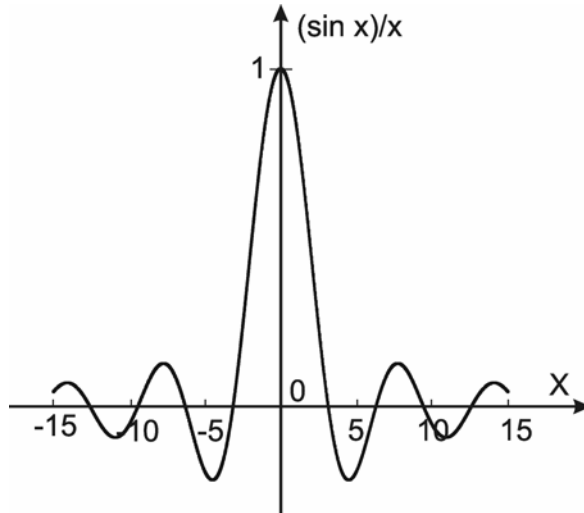
$$\begin{aligned} \int_{-\Delta k}^{+\Delta k} e^{i\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} (t-x)\xi} d\xi &= \int_{-\Delta k}^{+\Delta k} \left( \cos\left(\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} (t-x)\xi\right) + i \sin\left(\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} (t-x)\xi\right) \right) d\xi = \\ &= -2 \sin\left(\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} (t-x)\xi\right) \Big|_0^{\Delta k} \frac{1}{\frac{d\omega}{dk}\Big|_{k_0} (t-x)} = \\ &= \frac{2}{\frac{d\omega}{dk}\Big|_{k_0} (t-x)} \sin\left(\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} (t-x)\Delta k\right) \end{aligned} \quad (2.33)$$

Bevezetve a

$$z = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} (t-x)\Delta k \quad (2.34)$$

új változót, a keresett végeredmény:

$$\Psi(x,t) = A \frac{\sin z}{z} e^{i(\omega_0 t - k_0 x)}. \quad (2.35)$$



**2.3. ábra:** A  $\sin(x)/x$  függvény

A (2.35) hullámfüggvény kiküszöböli a síkhullámnál jelentkező mindkét problémát.

Először: térben lokalizált. Ez a lokalizáció függ attól, hogy mekkora  $\Delta k$  intervallumból indultunk ki. Minél szűkebb a  $\Delta k$  intervallum, térben annál szélesebb hullámcsomagot kapunk. Ennek a határesetét, amikor egyetlen  $k$  értékből indultunk ki már láttuk – ez volt a síkhullám, amely a valós térben lokalizálatlan. A másik határeset az lenne amikor a hullám megszerkesztésekor végtelen sok  $k$  értéket vennénk – ebben az esetben a hullámfüggvény a valós térben pontosan lokalizált (Dirac-delta funkcionál alakú, lásd a II. Függelékét), azonban nem tudunk hozzá semmilyen  $k$  értéket rendelni, ugyanis ebben az esetben a  $k$ -térben nincs lokalizálva a hullámfüggvény. Véges  $\Delta k$  intervallum esetén érdekes összefüggés van a  $k$ -térbeli lokalizáció és a valós térbeli lokalizáció között. Ez előrevetíti a kvantummechanika egyik legfontosabb összefüggését, a Heisenberg-féle határozatlansági relációt, amelynek értelmében minél pontosabban ismerjük a részecske impulzusát ( $k$  értékét), annál kevésbé tudjuk a részecskét térben lokalizálni.

Másodszor: az így kapott hullámcsomagunk a tér  $x$  irányában tovaterjed. A maximum helyének a tovaterjedési sebességét a csoportsebesség adja meg. Azonnal bebizonyítható, hogy ez megegyezik a vizsgált részecske sebességével. A hullámcsomag maximumát  $z = 0$  értékre veszi fel. A  $z = 0$  feltételből a (2.34) egyenlet megadja a csoportsebességet:

$$x = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} t = v_g t \Rightarrow v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} \quad (2.36)$$

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\frac{mv^2}{2}}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{k^2 \hbar^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar}{2m} k^2 \quad (2.37)$$

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} = \frac{\hbar}{m} k_0 = \frac{\hbar}{m} \frac{p_0}{\hbar} = v_0. \quad (2.38)$$

Vagyis:

$$v_g = v_0. \quad (2.39)$$

A hullámcsomag sebessége tehát a  $k_0$  hullámszámú síkhullámnak megfelelő szabad részecske  $v_0$  sebessége – ahogy annak lennie is kell.

## 2.5 Davisson és Germer kísérlete

Amikor elektronokat ütköztetünk tiszta fémfelülettel, a visszavert elektronnyaláb intenzitásában többféle periodicitás észlelhető. 1926-ban Clinton Joseph Davisson meghallgatta de Broglie előadását, és rájött arra, hogy az a periodicitás, amit ők korábban megfigyeltek, az tulajdonképpen elektronok diffrakciója kristályrácsra. A kísérletekben az elektronok pontosan akkora

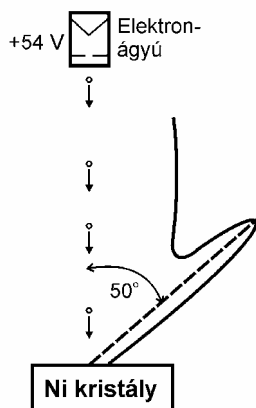
hullámhosszú hullámként viselkedtek, amekkora a de Broglie-képletből várható volt (2.4 és 2.5 ábra).

A visszavert nyaláb intenzitásában kétféle periodicitás észlelhető, egyik a visszaverődési szög függvényében, másik a felületre eső elektronnyaláb energiájának a függvényében. A diffrakciós maximumok feltétele:

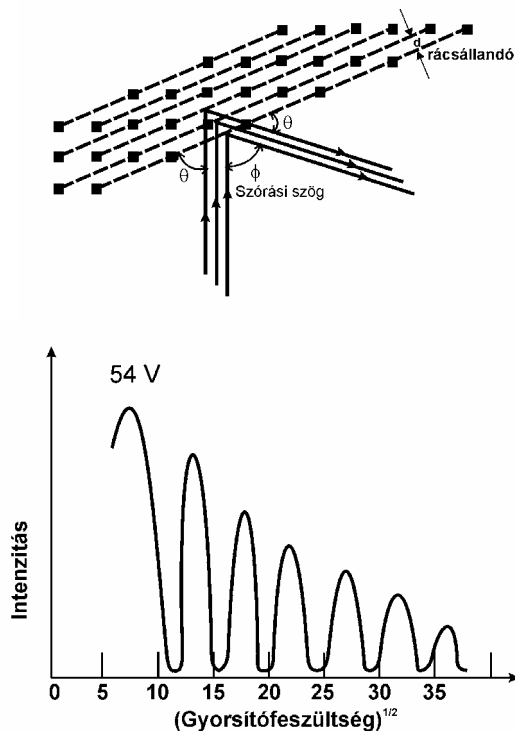
$$2d \sin \theta = n\lambda = n \frac{h}{p}, \quad (2.40)$$

ahol  $d$  a kristályrács rácsállandója,  $\lambda$  pedig az elektron feltételezett hullámhossza, amit a de Broglie-összefüggés ad meg.

A Davisson–Germer-kísérlet mind a kristályrácsok létét (ami akkoriban szintén még csak feltételezés volt), mind az elektron hullámtermészetét igazolta. Később sikerült Young-féle interferencia-kísérletet is elvégezni elektronokon (Tonomura 1989), ahol az optikából jól ismert interferenciaképet kapták. Akárcsak a Davisson–Germer-kísérlet, ez a kísérlet is az elektronhoz rendelt, úgynevezett „anyag hullámok” létét igazolta.



**2.4. ábra:** Davisson–Germer-kísérlet :  
kristályrácsra eső elektronok diffrakciója során különböző szögekre kapunk maximumot a visszavert elektronsugárban



**2.5. ábra:** Davisson–Germer-kísérlet : változtatva az elektronok gyorsítófeszültségét, rögzített szóródási szögre bizonyos gyorsítófeszültségeknél (hullámhosszaknál) kapunk maximumot a kristályrács szóródott elektronnyaláb intenzitására. Ennek az oka az, hogy a különböző energiájú elektronnyalábokhoz különböző hullámhosszat kell rendelni

## 2.6 Javasolt feladatok

2.1 a) A Bohr-modell segítségével számítsuk ki a Lyman-, Balmer- és Paschen-sorozatok első négy vonalát (összesen tizenkét hullámhosszat). Milyen színűek a Balmer-sorozat vonalai (körülbelül)? b) Mit kell megváltoztatni a használt képletben, ha a  $\text{He}^+$  ion színeképvonalait akarjuk kiszámítani? Az előbb kapott vonalaknak megfelelő vonalak közül van-e olyan, amely ebben az esetben is a látható tartományba esik? A látható tartományt vegyünk 400-tól 700 nm-ig az egyszerűség kedvéért.

2.2 Mekkora lesz egy egyenlő de Broglie hullámhosszú proton és elektron mozgási energiájának az aránya?

2.3 Hasonlítsuk össze a következő testek de Broglie hullámhosszát:

- a. Egy személygépkocsi, amely 70 km/h sebességgel halad és 1500 kg tömegű;
- b. Egy 10 g tömegű puskagolyó, amely 900 m/s sebességgel lövődik ki;
- c. A levegő nitrogén molekulái szobahőmérsékleten ( $m = 4.6 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$ ,  $\langle v \rangle = 500 \text{ m/s}$ );
- d. 500 m/s sebességgel mozgó elektron.

2.4 A „Mathematica” programmal [vagy ha nincs „Mathematica”-hoz hozzáférésünk, akkor „Matlab”, „Maple”, vagy ha az sincs, akkor C-ben] írjuk meg a következő rövid programot: adjunk össze több  $\cos(kx)$  függvényt, ahol a  $k = i/100$  és az  $i$  egész szám értékeit a  $[-N, N]$  halmazból vesszük. Az eredményt normáljuk, majd ábrázoljuk a  $[-2\pi, 2\pi]$  tartományon. Rajzoljuk ki a függvényt  $N = 1, 10, 40, 100$  és  $N = 200$  értékekre. Mi történik a térbeli hullámfüggvénnyel, amikor egyre több hullámvektort veszünk be az összegbe?

### 3. FEJEZET

## A hullámfüggvény és a Schrödinger-egyenlet

Posztulátumok segítségével precízen megalapozzuk a kvantummechanikát. Részletesen tárgyaljuk a mozgó részecskéket jellemző hullámfüggvényt, ennek fizikai értelmezést adunk, bevezetjük az impulzustérbeli hullámfüggvényt, és posztuláljuk a hullámfüggvény evolúcióját megadó egyenletet. Ez az egyenlet a híres Schrödinger-egyenlet.

### 3.1 A hullámfüggvény fizikai értelmezése és normálása

A hullámfüggvényről eddig a következőket derítettük ki: (i) ezt a függvényt minden mozgó elemi részecskéhez hozzárendelhetjük; (ii) a szimmetria-tulajdonságok miatt ez a függvény egy valós változós komplex függvény kell hogy legyen; (iii) egy szabad részecskéhez nem egyetlen síkhullámot, hanem több síkhullám összegeként megadott hullámcsomagot kell hozzárendelni annak érdekében, hogy a hullámfüggvény térben lokalizált legyen, és a hullámcsomag a részecske sebességének megfelelő sebességgel haladjon.

#### 1. posztulátum

**Fizikai értelmet a hullámfüggvény modulusnégyzetének ( $\Psi\Psi^*$ ) tulajdonítunk. Ez megadja az adott pontban és adott időpillanatban a részecske megtalálhatósági valószínűség-sűrűségét. Matematikailag felírva:**

$$\Psi(\vec{r}, t)\Psi^*(\vec{r}, t)d\vec{r} = P(\vec{r}, \vec{r} + d\vec{r}, t), \quad (3.1)$$

ahol  $d\vec{r} = dx dy dz$ .

A fenti (3.1) képlet alapján annak a valószínűsége ( $P(\vec{r}, \vec{r} + d\vec{r}, t)$ ), hogy a részecske a  $t$  időpillanatban az  $\vec{r}$  és  $\vec{r} + d\vec{r}$  koordináták között legyen:  $\Psi(\vec{r}, t)\Psi^*(\vec{r}, t)d\vec{r}$ . Ahhoz, hogy ennek a hullámfüggvénynek elfogadható valószínűségi értelmezése legyen, a hullámfüggvény *normált* kell hogy legyen. A hullámfüggvény normálásán azt értjük, hogy a hullámfüggvényt úgy kell megszerkeszteni, hogy a részecskének a számára megengedett térben való megtalálhatósága a biztos esemény legyen. Ezért annak a valószínűsége, hogy a részecske valahol van a számára megengedett térben, 1 kell hogy legyen. Ha a részecske az egész térben mozoghat, ez matematikailag azt jelenti, hogy:

$$P(x \in [-\infty, \infty], y \in [-\infty, \infty], z \in [-\infty, \infty], t) = 1 \quad (3.2)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t) dx dy dz = \int_{\{\vec{r}\}} \Psi(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t) d\vec{r} = 1. \quad (3.3)$$

A fenti egyenlőségnek teljesülnie kell minden  $t$  időpillanatra. Ha a hullámfüggvény nem normált, akkor a (3.1) kijelentés nem egyenlőség, hanemcsak arányosság lesz, vagyis:

$$\Psi(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t) d\vec{r} \sim P(\vec{r}, \vec{r} + d\vec{r}, t).$$

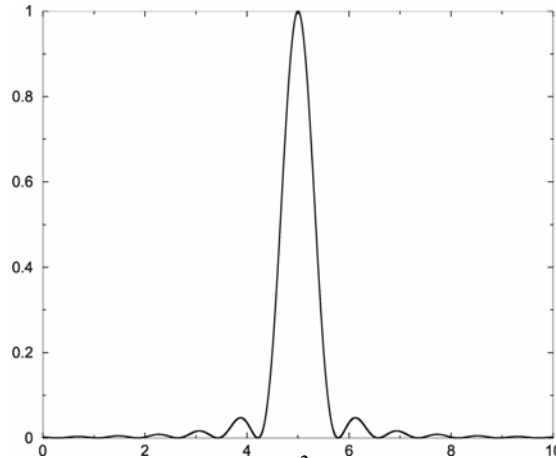
Ezen posztulátum kijelentése után talán azt is jobban megérthetjük, hogy sok esetben miért nem szerencsés egy szabad részecskéhez síkhullámot rendelni. Síkhullám esetén azonnal következik, hogy:

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \rightarrow \Psi(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t) = A^2 \quad (3.4)$$

Látható tehát, hogy a tiszta síkhullám egy konstans megtalálhatósági valószínűséget (pontosabban: valószínűség-sűrűséget) ad a tér minden pontjára. A részecske ezek alapján teljesen „lokalizálhatatlan” lenne. A másik nagy probléma ezzel a függvénnyel az, hogy klasszikusan felírt (3.3) típusú normálási egyenlettel nem normálható olyan esetben, ha a mozgás a térnek végtelen nagyságú tartományára is kiterjed. Később majd meglátjuk, hogy ilyen esetben egy általánosított, komplikáltabb normálást végezhetünk el. A hullámcsomag esetét megvizsgálva:

$$\Psi(x, t) = 2A \frac{\sin((vt - x)\Delta k)}{vt - x} e^{i(\omega_0 t - k_0 x)}$$

$$\Psi(x, t) \Psi^*(\vec{r}, t) = 4A^2 \left( \frac{\sin((vt - x)\Delta k)}{vt - x} \right)^2. \quad (3.5)$$



**3.1. ábra:**  $A (\sin(4(x-5))/(x-5))^2/16$  függvény. Ez például egy hullámcsomaghoz rendelt hullámfüggvény modulusnégyzete (szabad részecske megtalálhatósági valószínűség-sűrűsége) lehet. Van egy pont, ahol a részecske a legnagyobb valószínűséggel van jelen, és ez a pont a részecske  $v$  sebességével (csoportsebességgel) mozog

Az így kapott hullámfüggvény a (3.3) szerint normálható lesz az egész térre, ugyanis:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\sin(x)}{x} \right)^2 dx = \pi . \quad (3.6)$$

## 2. posztulátum

**A hullámfüggvény ismerete teljesen jellemzi a részecske (vagy esetenként a több részecskéből álló rendszer) állapotát.**

Ennek a posztulátumnak az értelmében nincs szükségünk a hullámfüggvénynél több ismeretre ahhoz, hogy a részecske állapotát leírjuk, ugyanakkor nem is mondhatunk el többet a részecskéről. Tehát ha megadtuk a hullámfüggvényt, akkor ez a rendszerről beszerezhető összes információt tartalmazza. Ennek analógiája a klasszikus mechanikában az, amikor egy részecskének ismerjük a koordinátáját és a sebességét adott időpillanatban.

## 3.2 A hullámfüggvény sok részecskéből álló rendszerek esetére

Ha több részecskéből álló rendszert akarunk leírni a hullámfüggvénnyel, akkor bevezethetünk egy olyan komplex hullámfüggvényt, amelyet  $N$  részecske esetén a  $3N+1$  dimenziós térben értelmezzünk:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) : 3^{N+1} \rightarrow \mathbb{C} \quad (3.7)$$

Ennek a sokrészecske hullámfüggvénynek hasonló fizikai értelmezést adunk, mint az egyrészecske hullámfüggvénynek. Úgy tekintjük, hogy magának a hullámfüggvénynek nincs fizikai értelme, hanem a modulusnégyzetének van. Ez a modulusnégyzet egy adott  $t$  időpillanatban megadja annak a valószínűségi-sűrűségét, hogy a rendszert alkotó részecskék az illető koordináta-intervallumokban találhatók (vagyis annak a valószínűsége, hogy az 1-es részecske koordinátája az  $\mathbf{r}_1$  és  $\mathbf{r}_1+d\mathbf{r}_1$  között legyen, a 2-es részecske koordinátája az  $\mathbf{r}_2$  és  $\mathbf{r}_2+d\mathbf{r}_2$  között legyen, és így tovább...). Matematikailag felírva:

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) \Psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N = \\ = P(\vec{r}_1, \vec{r}_1 + d\vec{r}_1; \vec{r}_2, \vec{r}_2 + d\vec{r}_2; \dots; \vec{r}_N, \vec{r}_N + d\vec{r}_N, t) \end{aligned}$$

A több részecske-hullámfüggvényt az egy részecske-hullámfüggvénnyel analóg módon normáljuk:

$$\int_{\{\vec{r}_1\}} \int_{\{\vec{r}_2\}} \dots \int_{\{\vec{r}_N\}} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) \Psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N = 1 . \quad (3.8)$$

### 3.3 A koordinátatérbeli és impulzustérbeli hullámfüggvény

A 2. posztulátum arra is utal, hogy az eddig használt hullámfüggvényünk segítségével lehetséges valamit mondani nemcsak a részecske helyzetéről, hanem az impulzusáról is.

#### Törvény

Ha ismerjük a  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  hullámfüggvényt, akkor kiszámíthatunk egy másik hullámfüggvényt,  $\Phi(\mathbf{p}, t)$ -t, amelyet impulzustérbeli hullámfüggvénynek nevezünk. Ennek az impulzustérbeli hullámfüggvénynek a modulusnégyzete megadja minden időpillanatban annak a valószínűség-sűrűségét, hogy az impulzus egy adott impulzus-intervallumban legyen (teljesen hasonlóan ahhoz, ahogyan a koordinátatérbeli hullámfüggvény  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  modulusnégyzete megadta azt a valószínűség-sűrűséget, amivel a koordináta egy adott koordináta-intervallumban volt). Matematikailag felírva:

$$\Phi(\vec{p}, t) \Phi^*(\vec{p}, t) d\vec{p} = P(\vec{p}, \vec{p} + d\vec{p}, t). \quad (3.9)$$

A koordinátatérbeli hullámfüggvényhez hasonlóan az impulzustérbeli hullámfüggvény is normált kell legyen. Az impulzustérbeli hullámfüggvényre a klasszikus normálás:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(\vec{p}, t) \Phi^*(\vec{p}, t) dp_x dp_y dp_z = \int_{\{\vec{p}\}} \Phi(\vec{p}, t) \Phi^*(\vec{p}, t) d\vec{p} = 1. \quad (3.10)$$

A  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  hullámfüggvény tartalmazza az összes információt a részecskéről, tehát a  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ -ből ki kell lehessen számítani a  $\Phi(\mathbf{p}, t)$ -t is. Ez valóban így is van, a két hullámfüggvény közti összefüggést egy Fourier-transzformáció adja meg. Ez a kijelentés bizonyítható, a bizonyítást azonban egy későbbi fejezetben adjuk majd meg.

$$\Phi(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\{\vec{r}\}} \Psi(\vec{r}, t) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} d\vec{r} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, y, z, t) e^{\frac{i}{\hbar} (p_x x + p_y y + p_z z)} dx dy dz \quad (3.11)$$

Az impulzustérbeli hullámfüggvényből a koordinátatérbeli hullámfüggvényt az inverz Fourier-transzformációval kapjuk meg:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\{\vec{p}\}} \Phi(\vec{p}, t) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} d\vec{p}. \quad (3.12)$$

A Fourier-transzformáció megtartja a függvény normáltságát. Ez azt jelenti, hogyha a koordinátatérbeli hullámfüggvényünk normált volt, akkor az impulzustérbeli hullámfüggvény is automatikusan normált lesz:

$$\int_{\{\vec{r}\}} \Psi(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t) d\vec{r} = 1 \Rightarrow \int_{\{\vec{p}\}} \Phi(\vec{p}, t) \Phi^*(\vec{p}, t) d\vec{p} = 1. \quad (3.13)$$

Mivel sokat fogunk foglalkozni egydimenziós feladatokkal, megjegyezzük itt, hogy egydimenzióban a Fourier-transzformációt a következőképpen adhatjuk meg:

$$F(x) \rightarrow G(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(x) e^{-ikx} dx. \quad (3.14)$$

### 3.4 Megtalálhatósági valószínűségek kiszámítása a hullámfüggvénnyel

Ha adott a  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  hullámfüggvényünk egy részecskére, akkor ennek segítségével kiszámíthatjuk, hogy mi a valószínűsége annak, hogy adott időpillanatban a részecske  $x$  koordinátája  $x_1$  és  $x_2$ ,  $y$  koordinátája  $y_1$  és  $y_2$ , és  $z$  koordinátája  $z_1$  és  $z_2$  között legyen. Ez a valószínűség abban az esetben ha  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  normált:

$$P \begin{pmatrix} x_1 \dots x_2 \\ y_1 \dots y_2 \\ z_1 \dots z_2 \end{pmatrix} = \int_{x_1}^{x_2} dx \int_{y_1}^{y_2} dy \int_{z_1}^{z_2} dz \Psi(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t). \quad (3.15a)$$

Ha  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  nem normált:

$$P \begin{pmatrix} x_1 \dots x_2 \\ y_1 \dots y_2 \\ z_1 \dots z_2 \end{pmatrix} = \frac{\int_{x_1}^{x_2} dx \int_{y_1}^{y_2} dy \int_{z_1}^{z_2} dz \Psi(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t)}{\int_{\{\vec{r}\}} \Psi(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t) d\vec{r}}. \quad (3.15b)$$

Megjegyezzük itt, hogy ha a hullámfüggvény nem normált, és

$$\int_{\{\vec{r}\}} \Psi(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t) d\vec{r} = c, \quad (3.16)$$

ahol  $c$  véges érték, akkor a hullámfüggvény azonnal normálható, és a normált hullámfüggvény:

$$\frac{1}{\sqrt{c}} \Psi(\vec{r}, t). \quad (3.17)$$

Az impulzustérbeli hullámfüggvénnyel is hasonlóan lehet megtalálhatósági valószínűségeket kiszámítani, csak ebben az esetben azt kérdezzük, hogy mi a valószínűsége annak, hogy a részecske  $p_x$  impulzuskomponense  $p_{x1}$  és  $p_{x2}$ ,  $p_y$

impulzuskomponense  $p_{y1}$  és  $p_{y2}$ , illetve  $p_z$  impulzuskomponense  $p_{z1}$  és  $p_{z2}$  között legyen:

$$P \begin{pmatrix} p_{x_1} \dots p_{x_2} \\ p_{y_1} \dots p_{y_2} \\ p_{z_1} \dots p_{z_2} \end{pmatrix} = \int_{p_{x_1}}^{p_{x_2}} dp_x \int_{p_{y_1}}^{p_{y_2}} dp_y \int_{p_{z_1}}^{p_{z_2}} dp_z \Phi(\vec{p}, t) \Phi^*(\vec{p}, t). \quad (3.18)$$

### 3.5 A Schrödinger-egyenlet szabad részecskére

A Schrödinger-egyenlet a kvantummechanikai részecskék mozgásegyenlete, megadja a hullámfüggvény időbeli evolúcióját (változását).

#### 3. posztulátum

**Ha ismerjük a hullámfüggvényt egy adott időpillanatban, akkor létezik egy egyenlet, amellyel kiszámítható a hullámfüggvény teszőleges, későbbi időpillanatban. Ez az egyenlet a Schrödinger-egyenlet.**

Ez a posztulátum azt fejezi ki, hogy a kvantummechanika determinisztikus elmélet, vagyis, hogyha adott a rendszer állapota egy időpillanatban, ez meghatározza a rendszer állapotát bármely későbbi időpillanatban. A klasszikus mechanikával analóg módon: – ha a klasszikus mechanikában ismertük a részecske pozícióját és sebességét, akkor a mozgásegyenletekkel ki tudtuk számítani az új pozíciót és sebességet, – a kvantummechanikában, ismerve a hullámfüggvényt, a Schrödinger-egyenlettel kiszámíthatjuk az új hullámfüggvényt bármely későbbi időpillanatban.

A Schrödinger-egyenlet alakjának a megindoklásához, szükséges azonban először egy újabb posztulátumot kijelentenünk:

#### 4. posztulátum

**A szuperpozíció elve: ha  $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N$  hullámfüggvények valós fizikai állapotot írnak le, akkor  $\Psi_1 + \Psi_2 + \dots + \Psi_N$  is egy lehetséges fizikai állapotot ír le.**

Ezt a posztulátumot hallgatólagosan már alkalmaztuk, amikor megalkottuk a hullámcsomagot.

A Schrödinger-egyenletet általában posztulátumként vezetjük be. A posztulátumokat nem bizonyítjuk, itt azonban megindokoljuk a Schrödinger-egyenlet alakját, előrevetítjük azonban, hogy ez nem lesz precíz bizonyítás.

Amint már említettük, a Schrödinger-egyenletnek hasonló szerepe van, mint a dinamika 2. törvényének:

$$\Psi_0(\vec{r}, t) \xrightarrow{\text{Schrödinger egyenlet}} \Psi(\vec{r}, t) \text{ Schrödinger-egyenlet}$$

$$\vec{r}_0, \vec{v}_0 \xrightarrow{\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} = m \frac{d^2\vec{r}}{dt^2}} \vec{r}(t), \vec{v}(t) \text{ dinamika 2. törvénye}$$

Tulajdonságok, amelyeket elvárunk a Schrödinger-egyenlettől:

1. A Schrödinger-egyenlet *lineáris* és *homogén* kell hogy legyen  $\Psi(\vec{r}, t)$ -ben, vagyis  $\Psi(\vec{r}, t)$ -t első fokon kell hogy tartalmazza (lineáris), és  $\Psi(\vec{r}, t)$  minden tagban ugyanazon a fokon kell hogy szerepeljen (homogén).

Amint a 4. posztulátum kijelenti, a kvantummechanika hullámfüggvényeire igaz a szuperpozíció elve:

$$\Psi_1, \Psi_2 \longrightarrow c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2.$$

Ahhoz, hogy ez teljesüljön, azonnal következik, hogy a Schrödinger-egyenlet lineáris és homogén kell hogy legyen.

2. A Schrödinger-egyenlet *időben maximum elsőrendű* differenciálegyenlet lehet, mert csak egy kezdeti ismert mennyiségünk van, mégpedig a hullámfüggvény a kezdeti időpillanatban, ami teljesen jellemzi a kvantummechanikai rendszer állapotát.

3. A *koreszpondencia elve*: a kvantummechanika egyenleteinek formailag hasonlóknak kell lenniük a klasszikus mechanika egyenleteihez, és a kvantummechanika határeseteként (nagy impulzusok határeseteként) vissza kell kapjuk a klasszikus mechanika egyenleteit.

A Schrödinger-egyenlet megindoklása (megszerkesztése):

Szabad részecskére felírhatjuk, hogy a hullámfüggvényt síkhullámok szuperpozíciója adja. A hullámvektor helyett az impulzust használva:

$$\Psi(\vec{r}, t) = c \int_{\vec{p}-\Delta\vec{p}}^{\vec{p}+\Delta\vec{p}} F(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)} d\vec{p}. \quad (3.19)$$

Ezzel a hullámfüggvénnyel a következő azonnali műveleteket végezhetjük:

$$\frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = c \int_{\vec{p}-\Delta\vec{p}}^{\vec{p}+\Delta\vec{p}} F(\vec{p}) \left( \frac{-iE}{\hbar} \right) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)} d\vec{p}; \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} = \vec{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial \Psi}{\partial z} = \nabla_{\vec{r}} \Psi(\vec{r}, t) =$$

$$= c \int_{\vec{p}-\Delta\vec{p}}^{\vec{p}+\Delta\vec{p}} F(\vec{p}) \left( \frac{i\vec{p}}{\hbar} \right) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)} d\vec{p}; \quad (3.21)$$

$$\nabla_{\vec{r}} \nabla_{\vec{r}} \Psi(\vec{r}, t) = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = \Delta_{\vec{r}} \Psi(\vec{r}, t) =$$

$$= c \int_{\vec{p}-\Delta\vec{p}}^{\vec{p}+\Delta\vec{p}} F(\vec{p}) \left( \frac{-\vec{p}^2}{\hbar^2} \right) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)} d\vec{p} \quad (3.22)$$

A klasszikus mechanikában egy szabadon mozgó részecskére ismert, hogy:

$$E = \frac{p^2}{2m}. \quad (3.23)$$

A fenti egyenlőséget és a (3.20) – (3.22) egyenleteket alkalmazva

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} \Psi(\vec{r}, t) = c \int_{\vec{p}-\Delta\vec{p}}^{\vec{p}+\Delta\vec{p}} F(\vec{p}) \left( E - \frac{\vec{p}^2}{2m} \right) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)} d\vec{p} = 0, \quad (3.24)$$

amiből következik, hogy:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} \Psi(\vec{r}, t). \quad (3.25)$$

A (3.25) olyan egyenlet, amely teljesíti mindhárom kiszabott feltételt, ezért ezt az egyenlet elfogadjuk úgy, mint a szabad részecske evolúciós egyenletét: ez a szabad részecskére felírt Schrödinger-egyenlet.

Ebben az egyenletben a klasszikus mechanikával való analógia szerint az első tag az energiához kötődik, míg a második tag az impulzushoz.

$$E = \frac{p^2}{2m} \xrightarrow{\text{e helyett a kvantummechanikában}} \hat{E}\Psi = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi,$$

ami a Schrödinger-egyenlet operátorokkal felírva.

Látható, hogy ott, ahol a klasszikus fizikában mennyiségeink vannak, formailag a kvantummechanikában *operátorokat* használunk. Az operátor hasonlít egy függvényhez, a különbség az, hogy míg a függvények egy számhalmaz elemeit képezik le egy másik számhalmazba, addig az operátorok egy függvénytér elemeit viszik át egy másik függvénytérbe (függvényeket transzformálnak át):

függvény: szám  $\longrightarrow$  újabb szám

operátor: függvény  $\longrightarrow$  újabb függvény

Operátor például a deriválás, a határozatlan integrálás vagy egy függvénnyel való beszorzás. A mi esetünkben az  $\hat{E}$  és a  $\hat{p}$  operátorok idő-, illetve térkoordináta szerinti deriválásokat jelentettek. A fentiek értelmében az áttérés a klasszikus mechanikáról a kvantummechanikára formailag úgy történik, hogy a fizikai mennyiségekhez operátorokat rendelünk. A klasszikus mechanika egyenletei igazak lesznek, ha ezekben a fizikai mennyiségek helyett a nekik megfelelő operátoroknak a hullámfüggvényre való hatását helyettesítjük be. Az operátorokat „kalappal” fogjuk jelölni:

$$A \longrightarrow \hat{A}$$

$$B \longrightarrow \hat{B}$$

A Schrödinger-egyenlet felírásánál szereplő operátorok:

$$\begin{aligned}\hat{E} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t}; \\ \hat{p} &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}} = -i\hbar \nabla_{\vec{r}}; \\ \hat{p}^2 &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right) = -i\hbar \nabla_{\vec{r}} (-i\hbar \nabla_{\vec{r}}) = -\hbar^2 \Delta_{\vec{r}}.\end{aligned}\quad (3.26)$$

### 3.6 Schrödinger-egyenlet kölcsönható részecskékre

Lássuk most, hogyan alakul a Schrödinger-egyenlet egy erőterben mozgó részecske esetében. Szabad részecske esetén már ismerünk egy eljárást, ahogy a klasszikus mechanika egyenleteiből megkapjuk a megfelelő kvantummechanikai egyenleteket. Ezt az eljárást fogjuk a továbbiakban is alkalmazni.

Az elméleti mechanikából ismerjük, hogy konzervatív terekben a Hamilton-függvény segítségével felírható az energia. Külső potenciál jelenlétében tudjuk, hogy a Hamilton-függvény:

$$E = H = T + V = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t). \quad (3.27)$$

Láttuk, hogy szabad részecskére a Schrödinger-egyenlet az  $E = H = p^2/2m$  klasszikus egyenletet tükrözi. Külső konzervatív térrel kölcsönható részecskék esetén a Schrödinger-egyenlet szintén az  $E=H$  egyenletet fogja tükrözni, de a  $H$  Hamilton-függvény alakja most a (3.27) lesz.

Ennek az egyenletnek szeretnénk megkeresni a kvantummechanikai megfelelőjét. Tudjuk már, hogy minden taghoz a hullámfüggvényre ható operátorokat kell rendelni, az újdonság az lesz, hogy a  $V$  potenciálhoz milyen

operátort rendelünk. **Kisegítő posztulátumként** elfogadhatjuk, hogy a koordináta és idő bármely függvényéhez egy egyszerű szorzó operátort rendelünk. Ezek alapján a  $V$  potenciálhoz rendelt operátor is egyszerű  $V$ -vel szorzó operátor lesz:

$$V \rightarrow \hat{V} = V(\vec{r}, t) \times. \quad (3.28)$$

A klasszikus mechanika egyenletével analóg módon felírhatjuk tehát a kvantummechanikai rendszerre jellemző Schrödinger-egyenletet:

$$\begin{aligned} \hat{E}\Psi &= \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi + \hat{V}(\vec{r}, t)\Psi; \\ \hat{E} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t}; \\ \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} + V(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (3.29)$$

ami a fenti operátor-alakok behelyettesítése után a Schrödinger-egyenletet eredményezi:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} \Psi + V(\vec{r}, t)\Psi. \quad (3.30)$$

Ez a Schrödinger-egyenlet egy részecskére tetszőleges  $V(\vec{r}, t)$  külső térben. A (3.30) egyenlet egy lineáris és homogén parciális differenciálegyenlet, amely  $t$  és  $\vec{r}$  szerinti deriváltakat tartalmaz. Ezt az egyenletet úgy tekinthetjük, mint egy evolúciós egyenletet, mert megadja azt, hogy időben hogyan változik (evolúál) a hullámfüggvény. Előrevetítjük azonban, hogy az

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H}\Psi \quad (3.31)$$

Schrödinger-egyenlet több, mint egyszerű evolúciós egyenlet. A (3.30) nemcsak a  $\Psi$  hullámfüggvény időbeli változását fogja megadni, hanem azt is, hogy melyek a lehetséges stacionárius állapotok. Stacionárius állapotoknak azon állapotokat nevezzük, amelyekben a hullámfüggvény modulusnégyzete időben állandó, és ezáltal a megtalálhatósági valószínűség-sűrűség stacionárius.

Ha csak egydimenzióban dolgozunk, akkor a Schrödinger-egyenlet egydimenziós parciális differenciálegyenlet, amely egyszerű potenciálok esetén sokszor analitikusan megoldható, és megkaphatók a stacionárius állapotok. Kétdimenziós problémák esetén már nagyon bonyolult megkeresni a (3.30) Schrödinger-egyenlet stacionárius állapotait, és a valós háromdimenziós térben csak nagyon kevés esetben lehet analitikus megoldásokat találni.

A Schrödinger-egyenletet részben posztulátumként vezettük be. Hogy tisztább legyen, mit is posztuláltunk, most kijelentjük ezt posztulátum formájában:

### 5. posztulátum

**Posztulátumként azt fogadhatjuk el, hogy a kvantummechanika keretében a klasszikus fizika mennyiségeinek operátorok felelnek meg, melyek a hullámfüggvényre hatnak. A klasszikus fizika egyenletei igazak maradnak a kvantummechanika keretében a hullámfüggvényre ható megfelelő operátorokra. A fizikai mennyiségekhez a következő módon rendelünk operátorokat:**

$$E \rightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}; \quad \mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}} = -i\hbar \nabla_{\vec{r}}; \quad \begin{matrix} x \rightarrow \hat{x} = x \times \\ y \rightarrow \hat{y} = y \times \\ z \rightarrow \hat{z} = z \times \\ \vec{r} \rightarrow \hat{\vec{r}} = \vec{r} \times \end{matrix},$$

$$F(\vec{r}, \vec{p}) \rightarrow \hat{F} = F(\vec{r}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}}).$$

A fenti egyenletben  $F$  tetszőleges fizikai mennyiség, ami a tér- és impulzuskoordináták függvénye.

### 3.7 Elektromágneses térben mozgó elektromosan töltött részecskére felírt Schrödinger-egyenlet

Az elektrodinamika keretében megtanultuk, hogy elektromágneses térben az  $\vec{A}$  vektorpotenciál és a  $\mathcal{A}$  skalárpotenciál segítségével tudjuk felírni a rendszer Hamilton-függvényét. Egy  $m$  tömegű és  $e$  elektromos töltéssel rendelkező részecskének az elektromágneses térben való mozgására:

$$E = H = \frac{1}{2m} [\vec{p} - e\vec{A}(\vec{r}, t)]^2 + e\mathcal{A}(\vec{r}, t). \quad (3.32)$$

A fizikai mennyiségekhez a már ismertetett módon operátorokat rendelve (lásd az 5. posztulátumot):

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}; \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}} = -i\hbar \nabla_{\vec{r}};$$

$$\hat{\vec{A}}(\vec{r}, t) = \vec{A}(\vec{r}, t) \times; \quad \hat{\mathcal{A}}(\vec{r}, t) = \mathcal{A}(\vec{r}, t) \times$$

megkapjuk a kvantummechanikai rendszert vezérlő Schrödinger-egyenletet elektromágneses térben mozgó részecske esetére is:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \frac{1}{2m} [-i\hbar \nabla_{\vec{r}} - e\vec{A}(\vec{r}, t)]^2 \Psi + e\mathcal{A}(\vec{r}, t) \Psi. \quad (3.33)$$

### 3.8 A Schrödinger-egyenlet sokrészecske-rendszerek esetén

Az egyrészecske hullámfüggvény helyett most a több részecske hullámfüggvényét használjuk, és a fizikai mennyiségekhez az ismert módon újból a hullámfüggvényre ható operátorokat rendelünk.

$$\Psi(\vec{r}, t) \longrightarrow \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$$

A külső térrel kölcsönható sokrészecske-rendszer Hamilton-függvénye:

$$E = H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) . \quad (3.34)$$

Ennek a klasszikus egyeletnek az operátorok ismert hozzárendelése során kapott kvantummechanikai megfelelője:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\Delta_i}{m_i} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) \quad (3.35)$$

Ez az egyenlet a sokrészecske-rendszer Schrödinger-egyenlete.

### 3.9 Az időtől független Schrödinger-egyenlet

A fizikában számtalan olyan problémával találkozunk, amikor a  $V$  potenciális energia nem függ az időtől:

$$V(\vec{r}, t) = V(\vec{r}) ; \quad \frac{dV}{dt} = 0 , \quad (3.36)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} \Psi + V(\vec{r}) \Psi . \quad (3.37)$$

Ilyen esetben léteznek stacionárius állapotok, amelyekben a hullámfüggvény modulusnégyzete időtől független. A Schrödinger-egyenletből meghatározhatók mind a stacionárius állapotok hullámfüggvényei, mind a stacionárius állapotok energiái. Ezekben a stacionárius állapotokban a Schrödinger-egyenlet megoldását (a hullámfüggvényeket) a:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}) \Omega(t) \quad (3.38)$$

alakban keressük. Ez a megoldás akkor jogos, ha ilyen formában valóban találunk elfogadható stacionárius megoldásokat. Behelyettesítve a (3.37) Schrödinger-egyenletbe:

$$i\hbar \Phi(\vec{r}) \frac{\partial \Omega(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Omega(t) \Delta_{\vec{r}} \Phi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \Phi(\vec{r}) \Omega(t) . \quad (3.39)$$

Végigosztva  $\Phi(\vec{r}) \Omega(t)$  vel:

$$i\hbar \frac{1}{\Omega(t)} \frac{\partial \Omega(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Phi(\vec{r})} \Delta_{\vec{r}} \Phi(\vec{r}) + V(\vec{r}) = E = konst. \quad (3.40)$$

Azonnal belátható, hogy a fenti egyenlet két egyenlettel ekvivalens, ugyanis az első tag csak  $t$ -től függ, a második csak  $\vec{r}$ -től függ. Ahhoz, hogy ez teljesülhessen, mindkettő ugyanazzal az  $E$  konstanssal kell hogy egyenlő legyen.

$$\begin{cases} i\hbar \frac{1}{\Omega(t)} \frac{\partial \Omega(t)}{\partial t} = E \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Phi(\vec{r})} \Delta_{\vec{r}} \Phi(\vec{r}) + V(\vec{r}) = E \end{cases} \quad (3.41)$$

A fenti egyenletek első egyenletének az értelmében meghatározható a stacionárius állapotokban a hullámfüggvény időtől függő része:

$$\frac{\partial \Omega(t)}{\Omega(t)} = \frac{E}{i\hbar} dt = -\frac{iE}{\hbar} dt$$

$$\ln(\Omega(t)) = -\frac{iE}{\hbar} t + c$$

$$\Omega(t) = A e^{-\frac{iE}{\hbar} t}. \quad (3.42)$$

A kapott megoldás elfogadható (vagyis jó úton járunk), ugyanis ezzel az időfüggéssel megszerkesztett megtalálhatósági valószínűség-sűrűség időtől független. A stacionárius állapotokban a hullámfüggvény térbeli koordinátáktól függő részére a következő differenciálegyenletet kapjuk:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Phi(\vec{r})} \Delta_{\vec{r}} \Phi(\vec{r}) + V(\vec{r}) = E, \quad (3.43)$$

amit röviden a

$$\hat{H}\Phi(\vec{r}) = E\Phi(\vec{r}) \quad (3.44)$$

alakban is felírhatunk. Ez az egyenlet a *stacionárius Schrödinger-egyenlet*. Az egyenlet nem más, mint a Hamilton-operátor ( $\hat{H}$ ) *sajátérték-egyenlete* (a sajátérték-egyenletekről bővebben a következő fejeztben fogunk tárgyalni). Az egyenletben ismeretlen a  $\Phi(\vec{r})$  függvény és az  $E$  értéke. Az egyenletnek nem minden  $\Phi(\vec{r})$  függvény esetén van megoldása. Azon  $\Phi(\vec{r})$  függvényeket, amelyekre a fenti egyenletnek van megoldása, *sajátfüggvényeknek* nevezzük. Egy  $\Phi(\vec{r})$  sajátfüggvényhez tartozó  $E$  értéket *sajátértéknek* nevezzük. Megoldani a stacionárius Schrödinger-egyenletet azt jelenti, hogy megkapjuk az összes lehetséges sajátfüggvényeket és a nekik megfelelő sajátértékeket.

Eredetileg a Schrödinger-egyenlettel az volt a célunk, hogy megkapjuk, hogyan változik az időben a  $\Psi(\vec{r}, t)$  hullámfüggvény, ha ismerjük ennek alakját

kezdetben. Amint látjuk azonban a Schrödinger-egyenlet ennél többet is jelent: megadja azt is, hogy melyek a stacionárius állapotok és ezekhez tartozó energiák. A stacionárius Schrödinger-egyenletből ily módon megkapható a stacionárius állapotok energiáinak a spektruma is. Meglátjuk, hogy van olyan eset, amikor az  $E$  sajátértékek folytonosan változnak (például egy szabad részecske esetén), vagyis folytonos spektrumot adnak, és van olyan eset (például végtelen mély potenciálgödörbe zárt részecske esete), amikor ez a spektrum diszkrét. Előfordulhat olyan eset is, hogy a diszkrét és folytonos spektrum is jelentkezik az  $E$  értékének a függvényében. Mindkét esetben igaz azonban, hogy egy valós fizikai problémára a lehetséges sajátértékek halmaza végtelen számosságú.

### 3.10 A kontinuitási egyenlet

A folyadékok dinamikájának vagy az elektromosságtannak a keretében már találkoztunk a kontinuitási egyenlettel:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0, \quad (3.45)$$

ahol  $\rho$  tömegsűrűséget, illetve töltéssűrűséget,  $\vec{j}$  pedig az áramsűrűséget jelentette. Az *áramsűrűség* az egységnyi idő alatt egységnyi keresztmetszetű felületen a felületre merőleges irányban áthaladó anyagmennyiséget vagy töltésmennyiséget jelenti. A kontinuitási egyenlet ezekben az esetekben az anyag, illetve a töltések megmaradásának a törvényét fejezte ki. A kvantummechanikában valószínűség-sűrűségről, illetve valószínűségi áramsűrűségről beszélhetünk, és a klasszikus fizikából ismert kontinuitási egyenlettel analóg egyenletet írhatunk fel. Ennek érdekében tekintsük a (3.30) Schrödinger-egyenletet és ennek komplex konjugáltját, majd ezeket szorozzuk be a hullámfüggvénnyel, illetve ennek komplex konjugáltjával:

$$\Psi^* \cdot / \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} \Psi + V(\vec{r}) \Psi; \quad (3.46)$$

$$\Psi \cdot / \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} \Psi^* + V(\vec{r}) \Psi^*. \quad (3.47)$$

A fenti két egyenletet kivonva egymásból:

$$i\hbar \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \Delta_{\vec{r}} \Psi - \Psi \Delta_{\vec{r}} \Psi^*); \quad (3.48)$$

$$i\hbar \frac{\partial (\Psi \Psi^*)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \Delta_{\vec{r}} \Psi - \Psi \Delta_{\vec{r}} \Psi^*) = 0; \quad (3.49)$$

$$i\hbar \frac{\partial(\Psi\Psi^*)}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \nabla_{\vec{r}} \Psi - \Psi \nabla_{\vec{r}} \Psi^*) \right) = 0. \quad (3.50)$$

Az így kapott egyenlet formálisan megfelel a kontinuitási egyenletnek a következő analógiákkal:

$$\Psi\Psi^* = \frac{P(\vec{r}, \vec{r} + d\vec{r}, t)}{d\vec{r}} \quad (3.51)$$

a valószínűség-sűrűség és

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla_{\vec{r}} \Psi - \Psi \nabla_{\vec{r}} \Psi^*) \quad (3.52)$$

a valószínűségi áramsűrűség. A kvantummechanika kontinuitási egyenlete a kvantumos részecske térbeli megtalálhatósági valószínűségének a megmaradását fejezi ki.

A kontinuitási egyenletnek egyik nagyon fontos következménye az, hogy amennyiben a hullámfüggvény egy adott időpillanatban normált, akkor a hullámfüggvény időben normált fog maradni, vagyis a hullámfüggvény normája az időben megmarad. Ez könnyen belátható, ha a kontinuitási egyenletet integráljuk az egész térre:

$$\int_{\vec{r}} i\hbar \frac{\partial(\Psi\Psi^*)}{\partial t} d\vec{r} + \int_{\vec{r}} \text{div} \left( \frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \nabla_{\vec{r}} \Psi - \Psi \nabla_{\vec{r}} \Psi^*) \right) d\vec{r} = 0. \quad (3.53)$$

A (3.53) második tagját a Gauss–Ostrogradskij-képlet szerint átalakítva egy felületi integrállá, azt kapjuk, hogy:

$$\int_{\{\vec{r}\}} \frac{\partial(\Psi\Psi^*)}{\partial t} d\vec{r} + \int_{\partial\{\vec{r}\}} \vec{j} ds = 0. \quad (3.54)$$

A fenti képlet második tagja a végtelenben vett felületen van integrálva, ahol azonban  $\vec{j} = 0$ . Egy normált hullámfüggvény a végtelenben nullához kell tartson, és ekkor az ilyen hullámfüggvényből megszerkesztett  $\vec{j}$  is nullához tart. Ezek alapján

$$\int_{\{\vec{r}\}} \frac{\partial(\Psi\Psi^*)}{\partial t} d\vec{r} = \frac{d}{dt} \int_{\{\vec{r}\}} \Psi\Psi^* d\vec{r} = 0, \quad (3.55)$$

vagyis a hullámfüggvény normája időben megmarad. Tehát a Schrödinger-egyenlet megtartja a hullámfüggvény normáltságát.

### 3.11 A Schrödinger-egyenlet az impulzustérbeli hullámfüggvény segítségével

Célunk most az, hogy felírjuk a Schrödinger-egyenletet az impulzustérbeli hullámfüggvényre. A valós térbeli hullámfüggvényre felírt Schrödinger-egyenletből indulunk ki:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \Leftrightarrow E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}). \quad (3.56)$$

Amint már tárgyaltuk, a valós térbeli, illetve az impulzustérbeli hullámfüggvényeket Fourier-transzformációval kapjuk meg egymásból:

$$\Phi(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\{\vec{r}\}} \Psi(\vec{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} d\vec{r};$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\{\vec{p}\}} \Phi(\vec{p}, t) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} d\vec{p}.$$

A fenti képletek alkalmazásával:

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\vec{p}, t)}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\{\vec{r}\}} \Psi(\vec{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} d\vec{r} \right] =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\{\vec{r}\}} \left[ i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \right] e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} d\vec{r} \quad (3.57)$$

A szögletes zárójelben levő részt behelyettesítjük az eredeti Schrödinger-egyenletből:

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\vec{p}, t)}{\partial t} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\{\vec{r}\}} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \right] e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} d\vec{r}; \quad (3.58)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\vec{p}, t)}{\partial t} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \int_{\{\vec{r}\}} \nabla(\nabla \Psi(\vec{r}, t)) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} d\vec{r} +$$

$$+ \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\{\vec{r}\}} V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} d\vec{r} \quad (3.59)$$

A (3.59) integrál két tagját külön számoljuk ki. Az első részt először is parciálisan integráljuk:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \int_{\{\vec{r}\}} \nabla(\nabla\Psi(\vec{r},t)) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} d\vec{r} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla\Psi e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \\ & - \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \int_{\{\vec{r}\}} \nabla\Psi(\vec{r},t) \left( -\frac{i}{\hbar} \vec{p} \right) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} d\vec{r}. \end{aligned} \quad (3.60)$$

A fenti képlet első tagjában szerepel a  $\nabla\Psi$ , ami a végtelenben nulla. A második tag megmarad, ezt még egyszer parciálisan intergráljuk:

$$\begin{aligned} & - \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \int_{\{\vec{r}\}} \nabla\Psi(\vec{r},t) \left( -\frac{i}{\hbar} \vec{p} \right) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} d\vec{r} = \frac{\vec{p}}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \left( \frac{i\hbar}{2m} \right) \int_{\{\vec{r}\}} \Psi(\vec{r},t) \left( -\frac{i}{\hbar} \vec{p} \right) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} d\vec{r} = \\ & = \left( \frac{p^2}{2m} \right) \left[ \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\{\vec{r}\}} \Psi(\vec{r},t) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} d\vec{r} \right] = \left( \frac{p^2}{2m} \right) \Phi(\vec{p},t). \end{aligned} \quad (3.61)$$

Az integrál második felének

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\{\vec{r}\}} \Psi(\vec{r},t) V(\vec{r},t) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} d\vec{r} \quad (3.62)$$

kiszámításához felhasználjuk a következő matematikai egyenlőséget:

$$\begin{aligned} V(\vec{r},t) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} &= V(i\hbar\nabla_{\vec{p}},t) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}; \\ \nabla_{\vec{p}} &= \frac{\partial}{\partial p_x} \hat{x} + \frac{\partial}{\partial p_y} \hat{y} + \frac{\partial}{\partial p_z} \hat{z}; \\ \nabla_{\vec{p}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} &= \frac{\partial}{\partial \vec{p}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} = -\frac{i}{\hbar} \vec{r} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}. \end{aligned} \quad (3.63)$$

Hogy jobban megértsük a (3.63) igaz voltát, tekintsük a következő példát. Legyen például:

$$V(\vec{r},t) = c_1 \vec{r} + c_2. \quad (3.64)$$

Azonnal belátható, hogy:

$$\begin{aligned} (c_1 \vec{r} + c_2) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} &= (c_1 i\hbar \nabla_{\vec{p}} + c_2) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} = \left( c_1 i\hbar \left( -\frac{i}{\hbar} \right) \vec{r} + c_2 \right) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} = \\ &= c_1 \vec{r} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} + c_2 e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \end{aligned}$$

A (3.63) alkalmazásával (3.62)-t tovább egyszerűsíthetjük:

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\{\vec{r}\}} \Psi(\vec{r},t) V(\vec{r},t) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} d\vec{r} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\{\vec{r}\}} \Psi(\vec{r},t) V(i\hbar\nabla_{\vec{p}},t) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} d\vec{r} =$$

$$= V(i\hbar \nabla_{\vec{p}}, t) \left[ \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\{\vec{r}\}} \Psi(\vec{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}\vec{r}} d\vec{r} \right] = V(i\hbar \nabla_{\vec{p}}, t) \Phi(\vec{p}, t). \quad (3.65)$$

A (3.59), (3.61) és (3.65) alapján felírhatjuk tehát a Schrödinger-egyenletet az impulzustérbeli hullámfüggvénnyel:

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\vec{p}, t)}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} \Phi(\vec{p}, t) + V(i\hbar \nabla_{\vec{p}}, t) \Phi(\vec{p}, t). \quad (3.66)$$

Ez az egyenlet, akárcsak a koordinátatérben felírt Schrödinger-egyenlet is, a

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$$

klasszikus egyenletnek a kvantummechanikai megfelelője, és ebből úgy származtatjuk, hogy a klasszikus fizikai mennyiségekhez oprátorokat rendelünk:

$$E, \vec{p}, \vec{r} \Rightarrow \hat{E}, \quad \hat{\vec{p}}, \quad \hat{\vec{r}}.$$

Ezek az oprátorok most az impulzustérbeli hullámfüggvényre hatnak, és az impulzustérbeli alakjuk:

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}; \quad \hat{\vec{p}} = \vec{p}; \quad \hat{\vec{r}} = i\hbar \nabla_{\vec{p}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}}. \quad (3.67)$$

Láttuk, hogy a koordinátatérben, amikor koordinátatérbeli hullámfüggvényekkel dolgoztunk, az impulzushoz rendeltünk deriválási oprátort és a térkoordinátákhoz rendeltünk egyszerű szorzó oprátorokat. Az impulzustérben, amikor az impulzustérbeli hullámfüggvényekkel dolgozunk, a térkoordinátákhoz deriválási oprátorokat és az impulzus-koordinátákhoz pedig egyszerű szorzó oprátorokat rendelünk.

### **3.12 Átlagértékek kiszámítása az impulzus- és koordinátatérben felírt hullámfüggvények segítségével**

Egy adott kvantummechanikai állapotban egy fizikai mennyiség többszöri kísérleti mérésekor más és más értékeket kaphatunk. A mérési eredmény matematikai szempontból egy valószínűségi változó, melyre az értékek eloszlása és a különböző rendű momentumok jól értelmezettek. A mérési eredmények eloszlásáról és a kvantummechanikai mérés következményeiről majd részletesen fogunk tárgyalni egy későbbi fejezetben, amikor a mérési posztulátumot is ismertetjük. Itt megtanuljuk, hogyan lehet elméletileg kiszámítani egy fizikai mennyiség átlagértékét tetszőleges kvantummechanikai állapotban, ha ismerjük a kvantummechanikai állapotot leíró hullámfüggvényt.

Tekintsünk először egy  $A$  fizikai mennyiséget, amely csak a térbeli  $\mathbf{r}$  koordináták értékétől függ:  $A = A(\mathbf{r})$ . Legyen a kvantummechanikai rendszerünk a  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  hullámfüggvénnyel jellemzett állapotban, és ebben az állapotban ki akarjuk számítani az  $A$  fizikai mennyiség átlagát ( $\langle A \rangle$  értékét). A normált hullámfüggvény értelmezéséből indulunk ki:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \Psi^*(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = P(\mathbf{r}, \mathbf{r} + d\mathbf{r}, t). \quad (3.68)$$

Tudjuk, hogy általánosan egy adott mennyiség átlagértékét a következőképpen lehet kiszámítani:

$$\langle A \rangle = \sum_{\mathbf{r}} A(\mathbf{r}) P(\mathbf{r}), \quad (3.69)$$

ahol  $P(\mathbf{r})$  az  $A(\mathbf{r})$  érték előfordulási valószínűsége.

Amint a valószínűség-számítás során megtanultuk (lásd I. Függelék), ha az  $A$  lehetséges értékei folytonos halmazt alkotnak ( $A$  folytonos változó), akkor az összegzés helyett integrált használunk. Felhasználva a hullámfüggvény valószínűségi értelmezését, azonnal következik:

$$\langle A \rangle = \int_{\mathbf{r}} A(\mathbf{r}) P(\mathbf{r}, \mathbf{r} + d\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = \int_{\mathbf{r}} A(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) \Psi^*(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}. \quad (3.70)$$

A normált koordinátatérbeli hullámfüggvényekkel, amelyek adottak egy kvantummechanikai állapotban, könnyen ki lehet számítani olyan mennyiségek átlagát, amelyek csak a térbeli koordinátáknak a függvényei (amennyiben persze az illető integrál könnyen elvégezhető). Megjegyezzük, hogy ha a koordinátatérbeli hullámfüggvényünk nem normált, akkor az  $\langle A \rangle$  átlagot a következőképpen számíthatunk:

$$\langle A \rangle = \frac{\int_{\mathbf{r}} A(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) \Psi^*(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}}{\int_{\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}, t) \Psi^*(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}}.$$

Egy olyan  $B = B(\mathbf{p})$  mennyiség esetén, amelyik csak az impulzustól függ (mint például a mozgási energia), a  $\langle B \rangle$  átlag kiszámításának az érdekében előnyös a normált impulzustérbeli hullámfüggvényt használni:

$$\langle B \rangle = \int_{\vec{p}} B(\vec{p}) P(\vec{p}, \vec{p} + d\vec{p}) = \int_{\vec{p}} B(\vec{p}) \Phi(\vec{p}, t) \Phi^*(\vec{p}, t) d\vec{p}. \quad (3.71)$$

Így, ha például a mozgási energiát akarjuk kiszámítani:

$$E_m = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \langle E_m \rangle = \int_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} \Phi(\vec{p}, t) \Phi^*(\vec{p}, t) d\vec{p}. \quad (3.72)$$

Könnyen belátható azonban, hogy a  $\langle B \rangle$  átlagot kiszámíthatjuk a koordinátatérben felírt normált hullámfüggvény segítségével is. Tekintsük először a legegyszerűbb esetet, amikor  $B = \mathbf{p}$ , és használjuk fel az

impulzustérbeli és koordinátatérbeli hullámfüggvények közti (3.11–3.12) egyenleteket:

$$\langle \vec{p} \rangle = \int_{\vec{p}} \vec{p} \Phi^*(\vec{p}, t) \Phi(\vec{p}, t) d\vec{p} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\vec{r}} \int_{\vec{p}} \Psi^*(\vec{r}, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}\right) \vec{p} \Phi(\vec{p}, t) d\vec{r} d\vec{p} \quad (3.73)$$

A fenti egyenletet tovább alakítva a következő formát kapjuk:

$$\langle \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\vec{r}} \int_{\vec{p}} \Psi^*(\vec{r}, t) \frac{\hbar}{i} \nabla_r \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}\right) \Phi(\vec{p}, t) d\vec{r} d\vec{p}; \quad (3.74)$$

$$\langle \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\vec{r}} \Psi^*(\vec{r}, t) \frac{\hbar}{i} \nabla_r \left[ \int_{\vec{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}\right) \Phi(\vec{p}, t) d\vec{p} \right] d\vec{r}; \quad (3.75)$$

$$\langle \vec{p} \rangle = \int_{\vec{r}} \Psi^*(\vec{r}, t) \frac{\hbar}{i} \nabla_r \Psi(\vec{r}, t) d\vec{r} = \int_{\vec{r}} \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{\vec{p}} \Psi(\vec{r}, t) d\vec{r}. \quad (3.76)$$

A fentiek alapján látható, hogy a  $\langle \vec{p} \rangle$  kiszámítása a koordinátatérbeli hullámfüggvénnyel formálisan úgy történik, hogy  $\vec{p}$  helyett a neki megfelelő operátort használjuk:

$$\vec{p} \rightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla_r. \quad (3.77)$$

Hasonló módon igazolható, hogy bármely  $B(\vec{p})$  fizikai mennyiség átlagértékét is kiszámíthatjuk a koordinátatérbeli hullámfüggvénnyel, a  $\vec{p}$ -t a (3.77) szerint a neki megfelelő operátorral helyettesítve:

$$\langle B(\vec{p}) \rangle = \int_{\vec{p}} B(\vec{p}) \Phi^*(\vec{p}, t) \Phi(\vec{p}, t) d\vec{p} = \int_{\vec{r}} \Psi^*(\vec{r}, t) B(-i\hbar \nabla_r) \Psi(\vec{r}, t) d\vec{r}. \quad (3.78)$$

Analóg módon: egy olyan  $A$  fizikai mennyiség átlagértéke, amely csak a térbeli koordinátáktól függ kiszámítható az impulzustérbeli hullámfüggvény segítségével is, az  $\vec{r}$  fizikai mennyiséget az impulzustérben neki megfelelő operátorral helyettesítve. Példaként számítsuk ki  $\langle \vec{r} \rangle$  értékét felhasználva ismét a koordinátatérbeli és impulzustérbeli hullámfüggvények közti (3.11–3.12) összefüggéseket:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} \rangle &= \int_{\vec{r}} \Psi^*(\vec{r}, t) \vec{r} \Psi(\vec{r}, t) d\vec{r} = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\vec{r}} \int_{\vec{p}} \Phi^*(\vec{p}, t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}\right) \vec{r} \Psi(\vec{r}, t) d\vec{r} d\vec{p} \end{aligned} \quad (3.79)$$

$$\langle \vec{r} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\vec{r}} \int_{\vec{p}} \Phi^*(\vec{p}, t) i\hbar \nabla_p \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}\right) \Psi(\vec{r}, t) d\vec{p} d\vec{r}; \quad (3.80)$$

$$\langle \vec{r} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\vec{p}} \Phi^*(\vec{p}, t) i\hbar \nabla_p \left[ \int_{\vec{r}} \Psi(\vec{r}, t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}\right) d\vec{r} \right] d\vec{p}; \quad (3.81)$$

$$\langle \vec{r} \rangle = \int_{\vec{p}} \Phi^*(\vec{p}, t) i\hbar \nabla_p \Phi(\vec{p}, t) d\vec{p} = \int_{\vec{p}} \Phi^*(\vec{p}, t) \hat{\vec{r}} \Phi(\vec{p}, t) d\vec{p}. \quad (3.82)$$

A fenti képletek értelmében, ha az impulzustérbeli hullámfüggvénnyel dolgozunk, az impulzusnak egyszerű szorzó operátort feleltetünk meg, a térbeli koordinátáknak azonban egy deriválási operátor felel meg:

$$\vec{r} \rightarrow \hat{\vec{r}} = i\hbar \nabla_p \quad (3.83)$$

Ha egy olyan  $A$  mennyiségnek akarjuk az átlagértékét kiszámítani az impulzustérbeli hullámfüggvény segítségével, amely csak a térbeli  $\vec{r}$  koordinátáktól függ, akkor a (3.78)-hoz hasonló módon járunk el:

$$\langle A(\vec{r}) \rangle = \int_{\vec{p}} \Phi^*(\vec{p}, t) A(i\hbar \nabla_p) \Phi(\vec{p}, t) d\vec{p} = \int_{\vec{p}} \Phi^*(\vec{p}, t) A(\hat{\vec{r}}) \Phi(\vec{p}, t) d\vec{p} \quad (3.84)$$

A fentiek alapján most már ki tudjuk számítani egy tetszőleges  $F(\vec{r}, \vec{p})$  fizikai mennyiség átlagát egy kvantumállapotban a koordinátatérbeli és az impulzustérbeli hullámfüggvény segítségével egyaránt. Ha a koordinátatérbeli hullámfüggvénnyel dolgozunk, a térbeli koordinátákhoz egyszerű szorzó operátorokat rendelünk, az impulzushoz meg a (3.77) értelmében térkoordináták szerinti deriválást feleltetünk meg. Ha az impulzustérbeli hullámfüggvénnyel dolgozunk, a térbeli koordinátákhoz a (3.83) értelmében impulzus szerinti deriválási operátort, az impulzus komponensekhez pedig egyszerű szorzó operátorokat rendelünk. Ezen megfeleltetések teljes összhangban vannak azokkal az operátor-megfeleltetésekkel, amelyeket a koordinátatérbeli és impulzustérbeli hullámfüggvényekre felírt Schrödinger-egyenlet esetén végeztünk.

$$\langle F(\vec{r}, \vec{p}) \rangle = \int_{\vec{r}} \Psi^*(\vec{r}, t) F(\vec{r}, -i\hbar \nabla_r) \Psi(\vec{r}, t) d\vec{r} \quad (3.85)$$

$$\langle F(\vec{r}, \vec{p}) \rangle = \int_{\vec{p}} \Phi^*(\vec{p}, t) F(\vec{p}, i\hbar \nabla_p) \Phi(\vec{p}, t) d\vec{p} \quad (3.86)$$

### 3.13 Javasolt feladatok

1. Igazoljuk, hogy szabad részecske esetén a  $\Psi(x, t) = \exp[i(kx - \omega t)]$  alakú hullámfüggvény megoldása a Schrödinger-egyenletnek.
2. Tekintsük a következő egydimenziós hullámfüggvényt:

$$\Psi(x, t) = N \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{x^2}{4\alpha^2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right).$$

- a. Számítsuk ki az  $N$  konstans értékét úgy, hogy a hullámfüggvény normált legyen.
- b. Adjuk meg a hullámfüggvény impulzustérbeli alakját.
- c. Számítsuk ki a következő átlagértékeket:

$$\langle x \rangle, \langle p \rangle, \langle x^2 \rangle, \langle p^2 \rangle, \langle x \cdot p \rangle.$$

- d. Számítsuk ki a  $\Delta x = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ , illetve a  $\Delta p = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$  mennyiségeket.
3. Az  $x$  tengely irányába levő eltolás operátorát egydimenzióban a  $\hat{T}_a \Psi(x) = \Psi(x+a)$  összefüggéssel értelmezzük. Igazoljuk, hogy  $\hat{T}_a = \exp\left(\frac{i}{\hbar} a \hat{p}_x\right)$ , ahol  $\hat{p}_a = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$  egy eltolás operátor.
4. Tekintsünk egy kvantummechanikai részecskét a  $2a$  szélességű ( $x \in [-a, a]$ ) végtelen mély potenciálgödörben a  $\Psi(x, t) = A \sin\left(\frac{\pi}{a} x\right) e^{i\omega t}$  hullámfüggvénnyel leírt állapotban. Ebben a stacionárius kvantummechanikai állapotban határozzuk meg:
- $A$  értékét úgy, hogy a hullámfüggvény normált legyen.
  - A  $\vec{j}$  valószínűségi áramsűrűség értékét.
  - Az  $\langle x \rangle_\Psi$ ;  $\langle x^2 \rangle_\Psi$ ;  $\langle p_x \rangle_\Psi$  és  $\langle p_x^2 \rangle_\Psi$  várható értékeket.
  - A  $\Delta x \Delta p_x$  határozatlanságot.

## 4. FEJEZET

### A hullámmechanika matematikai formalizmusa

Az eddigiekben intuitív alapon vezettük be a kvantummechanikában lényeges hullámfüggvényeket és operátorokat. Most, hogy már beláttuk mire jók a hullámfüggvények és az operátorok, ehhez az intuitív fizikai képhez egy precízebb matematikai formalizmust is megfogalmazunk.

#### 4.1 A hullámfüggvények Hilbert-tere és tulajdonságai

A hullámfüggvények valós változós komplex függvények:

$$\Psi : 3^n \rightarrow \mathbb{C},$$

ahol  $n$  a rendszer szabadsági fokainak számától függ. Ezekről a függvényekről megköveteljük, hogy a megengedett térre négyzetesen integrálhatók legyenek:

$$\int_{\{\vec{r}\}} \Psi^* \Psi d\vec{r} \neq \infty. \quad (4.1)$$

Ezen függvények összessége egy Hilbert-teret alkot ( $L_2$ ), amely térben ezekre a függvényekre a következő műveletek értelmezettek: összeadás, skalárral való szorzás, szorzás, komplex konjugálás és a skaláris szorzat.

#### Az összeadás (+)

Az összeadás tulajdonságai:

$$\Psi_1, \Psi_2 \in L_2 \Rightarrow \Psi_1 + \Psi_2 \in L_2, \text{ zárt az } L_2\text{-re nézve.} \quad (4.2)$$

$$\Psi_1 + \Psi_2 = \Psi_2 + \Psi_1, \text{ kommutatív.} \quad (4.3)$$

$$\Psi_1 + 0 = 0 + \Psi_1 = \Psi_1, \text{ létezik semleges elem: } 0. \quad (4.4)$$

$$\Psi_1 + (-\Psi_1) = 0, \text{ létezik inverz elem.} \quad (4.5)$$

$$\Psi_1 + (\Psi_2 + \Psi_3) = (\Psi_1 + \Psi_2) + \Psi_3, \text{ asszociatív.} \quad (4.6)$$

Az előbbiekből alapján következik, hogy  $(L_2, +)$  Abel-féle csoportot alkot.

#### Szorzás egy skalárral ( $\cdot$ )

A skalárral való szorzás tulajdonságai:

$$\Psi \in L_2; \lambda \in \mathbb{C}, \forall \Rightarrow \Psi \cdot \lambda \in L_2 \quad (4.7)$$

$$\Psi \cdot \lambda = \lambda \cdot \Psi, \quad (4.8)$$

$$\Psi \cdot 1 = 1 \cdot \Psi = \Psi, \quad (4.9)$$

$$\lambda_1 \cdot (\lambda_2 \cdot \Psi) = (\lambda_1 \cdot \lambda_2) \cdot \Psi, \quad (4.10)$$

$$(\lambda_1 + \lambda_2) \cdot \Psi = \lambda_1 \cdot \Psi + \lambda_2 \cdot \Psi, \quad (4.11)$$

$$\lambda \cdot (\Psi_1 + \Psi_2) = \lambda \cdot \Psi_1 + \lambda \cdot \Psi_2. \quad (4.12)$$

### Komplex konjugálás (\*)

A komplex konjugálás egy zárt művelet az  $L_2$ -n! Tulajdonságok:

$$\Psi_1 \in L_2 \Rightarrow \Psi_1^* \in L_2 \text{ (zárt)}, \quad (4.13)$$

$$(\Psi_1^*)^* = \Psi_1, \quad (4.14)$$

$$(\Psi_1 + \Psi_2)^* = \Psi_1^* + \Psi_2^*, \quad (4.15)$$

$$(\lambda \Psi)^* = \lambda^* \cdot \Psi^*. \quad (4.16)$$

### Skaláris szorzat (< | >)

A skaláris szorzatot két hullámfüggvényre értelmezzük, és eredményül egy komplex számot kapunk:

$$\Psi_1, \Psi_2 \in L_2 \Rightarrow \langle \Psi_1, \Psi_2 \rangle \in \mathbb{C}, \text{ vagyis } \langle \Psi_1, \Psi_2 \rangle \notin L_2. \quad (4.17)$$

A Hilbert-tereken értelmezett skaláris szorzat, értelmezés alapján, a következő három tulajdonságnak kell hogy eleget tegyen:

$$\text{I.} \quad \langle \Psi_1, \Psi_1 \rangle \in \mathbb{R} \text{ és } \langle \Psi_1, \Psi_1 \rangle \geq 0,$$

ugyanakkor ha

$$\langle \Psi_1, \Psi_1 \rangle = 0 \Leftrightarrow \Psi_1 = 0; \quad (4.18)$$

$$\text{II.} \quad \langle \Psi_1, c_2 \Psi_2 + c_3 \Psi_3 \rangle = c_2 \langle \Psi_1, \Psi_2 \rangle + c_3 \langle \Psi_1, \Psi_3 \rangle; \quad (4.19)$$

( $c_2$  és  $c_3 \in \mathbb{C}$ ).

$$\text{III.} \quad \langle \Psi_1, \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_2, \Psi_1 \rangle^*. \quad (4.20)$$

Az  $L_2$ -n értelmezett hullámfüggvények esetén a skaláris szorzatot a következőképpen értelmezzük:

$$\langle \Psi_1, \Psi_2 \rangle = \int_{\{\vec{r}\}} \Psi_1^* \Psi_2 d\vec{r}. \quad (4.21)$$

Ez az értelmezési mód teljesíti az előbb felsorolt három feltételt. A bizonyítás azonnali. A skaláris szorzatra bebizonyítható a Schwartz-féle egyenlőtlenség (javasolt feladat):

$$|\langle \Psi_1, \Psi_2 \rangle|^2 \leq \langle \Psi_1, \Psi_1 \rangle \langle \Psi_2, \Psi_2 \rangle, \forall \Psi_1, \Psi_2 \in L_2. \quad (4.22)$$

Bizonyítható ugyanakkor, hogy a fenti egyenlőtlenségben az egyenlőség akkor áll fenn, ha

$$\Psi_1 = c \Psi_2. \quad (4.23)$$

## 4.2 Ortonormált bázisok

Az  $L_2$  Hilbert-téren értelmezhetünk egy bázist, amit rendszerint arra használunk, hogy „reprezentáljuk” egy tetszőleges elemét a térnek. Analóg példa az, amikor három koordinátával jellemzünk egy háromdimenziós vektort; amikor a hatványok szerint kifejtünk tetszőleges függvényt (Taylor-sorbafejtés); vagy amikor a harmonikus függvények szerint sorbafejtünk egy tetszőleges függvényt egy véges intervallumon (Fourier-sorfejtés). A bázis több báziselemből áll, amelyek bizonyos feltételeket kell hogy teljesítsenek. Legyen az:  $u_1, u_2, \dots, u_n, \dots \in L_2$  elemekből álló bázisunk. Ha ezen elemek bázist alkotnak  $L_2$ -n akkor:

1. A báziselemek lineárisan függetlenek kell legyenek:

$$c_1 u_1 + c_2 u_2 + c_3 u_3 + \dots = 0 \Rightarrow \forall c_i = 0; c_i \in \mathbb{R} \quad (4.24)$$

2. Minden függvényt az  $L_2$ -ből fel kell lehessen írni a báziselemekkel (a teljesség feltétele) mint:

$$\forall \Psi \rightarrow \Psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i u_i; c_i \in \mathbb{R}. \quad (4.25)$$

A bázisvektorok száma megadja a tekintett tér dimenzióját. Egy adott térben végtelen sok módon megválaszthatók a bázisvektorok. A leggyakrabban használt bázisok az úgynevezett *ortonormált bázisok*. Az ortonormált bázis elemei normáltak és páronként merőlegesek egymásra. A *merőlegességet* az  $L_2$  térben a skaláris szorzattal definiáljuk. Azt mondjuk, hogy két elem merőleges egymásra, ha skaláris szorzatuk nulla:

$$u_1, u_2 \in L_2, u_1 \perp u_2 \Leftrightarrow \langle u_1, u_2 \rangle = 0. \quad (4.26)$$

Egy ortonormált bázis elemeire tehát igaz, hogy

$$\langle u_i, u_j \rangle = \delta_{ij}, \quad (4.27)$$

ahol a Kronecker-delta szimbólumot használtuk:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (4.28)$$

Ahhoz hogy az  $\{u_i\}$  ortonormált elemekből álló halmaz bázist alkosson, a tekintett Hilbert-téren, még szükséges, hogy a (4.25) teljességi feltétel is fennálljon. A (4.24) lineáris függetlenség automatikusan teljesül, ha (4.27) igaz. A teljesség feltétele igaz, ha:

$$\sum_{i=1}^{\infty} u_i^*(\xi) u_i(\xi') = \delta(\xi - \xi') = \begin{cases} \infty, & \xi = \xi' \\ 0, & \xi \neq \xi' \end{cases} \quad (4.29)$$

A feni képletben a *Dirac-féle általánosított függvényt (funkcionált)* használtuk, melynek alapvető tulajdonságai:

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty, & x = 0 \\ 0, & x \neq 0 \end{cases};$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1;$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a) f(x) dx = f(a). \quad (4.30)$$

Az, hogy a (4.29) összefüggés azonos a (4.25) teljességi feltétellel, egyszerűen belátható. Tételezzük fel, hogy:

$$\Psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i u_i \in L_2 \quad (4.31)$$

Az egyenletet jobbról beszorozva az egyik  $u_j$  elemmel

$$\langle u_j, \Psi \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \langle u_j, u_i \rangle = c_j \Rightarrow c_j = \langle u_j, \Psi \rangle, \quad (4.32)$$

ami alapján:

$$\Psi = \sum_{i=1}^{\infty} \langle u_i, \Psi \rangle u_i, \forall \Psi \in L_2. \quad (4.33)$$

A hullámfüggvényre értelmezett skaláris szorzat (4.21) alakját felhasználva a fenti képlet:

$$\Psi(\xi') = \sum_{i=1}^{\infty} \left[ \int_{\{\xi\}} u_i^*(\xi) \Psi(\xi) d\xi \right] u_i(\xi'). \quad (4.34)$$

Felcserélve az összegzést és integrálást:

$$\Psi(\xi') = \int_{\{\xi\}} \left[ \sum_{i=1}^{\infty} u_i^*(\xi) u_i(\xi') \right] \Psi(\xi) d\xi. \quad (4.35)$$

A Dirac-funkcionál (4.30) tulajdonságai alapján és (4.35)-ből azonnal következik, hogy:

$$\sum_{i=1}^{\infty} u_i^*(\xi) u_i(\xi') = \delta(\xi - \xi'). \quad (4.36)$$

Az egész gondolatmenetet visszafelé is végigvezethetjük. Ezáltal bizonyítottuk, hogy ortonormált bázisok esetén (4.29) ekvivalens a (4.25) teljességi feltétellel. Ortonormált bázisok esetén azonnal bebizonyítható egy másik fontos egyenlet, a Parseval-féle összefüggés is. Legyen  $\{u_i\}$  egy ortonormált bázis és

$\Psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i u_i \in L_2$ . Ebben az esetben a Parseval-összefüggés:

$$\sum_{i=1}^{\infty} c_i^* c_i = \langle \Psi, \Psi \rangle. \quad (4.37)$$

A bizonyítás egyszerű. (4.32) értelmében:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{\infty} c_i^* c_i &= \sum_{i=1}^{\infty} \langle u_i, \Psi \rangle^* \langle u_i, \Psi \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \left[ \int_{\{\xi\}} u_i(\xi) \Psi^*(\xi) d\xi \right] \left[ \int_{\{\xi'\}} u_i^*(\xi') \Psi(\xi') d\xi' \right] = \\ &= \int_{\{\xi'\}} \int_{\{\xi\}} \left[ \sum_{i=1}^{\infty} u_i^*(\xi') u_i(\xi) \right] \Psi^*(\xi) \Psi(\xi') d\xi' d\xi = \int_{\{\xi'\}} \int_{\{\xi\}} \delta(\xi - \xi') \Psi^*(\xi) \Psi(\xi') d\xi' d\xi = \\ &= \int_{\{\xi'\}} \Psi^*(\xi) \Psi(\xi) d\xi = \langle \Psi, \Psi \rangle. \end{aligned}$$

Normált  $\Psi$  hullámfüggvények esetén:  $\sum_i c_i^* c_i = 1$ .

### 4.3 Az altér fogalma

Legyen az  $L_2$  Hilbert-terünk,  $u_1, u_2, \dots, u_n, \dots \in L_2$  pedig egy bázis ezen a téren. A bázisvektorainknak egy tetszőleges  $k$  számú elemből álló  $K$  alhalmaza,  $(u_1, u_2, \dots, u_k)$ , egy  $k$  dimenziós alteret definiál. A  $K$  altér tetszőleges eleme kifejezhető az  $u_1, u_2, \dots, u_k$  bázisvektorok lineáris kombinációjaként. Azt is mondhatjuk, hogy a  $K$  altér azon  $\xi \in L_2$  elemek összesége, amelyekre igaz, hogy:  $\xi = \sum_{i=1}^k c_i u_i$ , ahol  $c_i \in \mathbb{C}$  tetszőleges komplex számok. Az adott  $K$  altérben többféle bázist szerkeszthetünk, ezek azonban mind  $k$  darab egymástól lineárisan független elemet kell hogy tartalmazzanak.

### 4.4 Operátorok

A kvantummechanika keretében a fizikai mennyiségekhez operátorokat rendelünk, melyek a hullámfüggvényekre hatnak:  $A \rightarrow \hat{A}$ .

#### Lineáris operátorok

A kvantummechanikában csak lineáris operátorokkal dolgozunk. A lineáris operátorok definíciója:

$$\begin{aligned} \forall \lambda_{1,2} \in \mathbb{C}; \Psi_{1,2} \in L_2 \Rightarrow \\ \Rightarrow \hat{A}(\lambda_1 \Psi_1 + \lambda_2 \Psi_2) = \lambda_1 \hat{A} \Psi_1 + \lambda_2 \hat{A} \Psi_2. \end{aligned} \quad (4.38)$$

## Az adjungált operátor

Legyen  $\hat{A}$  az  $L_2$  Hilbert-téren ható tetszőleges lineáris operátor. Bármely ilyen operátorhoz hozzárendelhető egy adjungált operátor:  $\hat{A}^*$  ( $\hat{A} \rightarrow \hat{A}^*$ ), amelyet a következőképpen értelmezünk:

$$\forall(\Theta, \Psi \in L_2): \langle \Theta, \hat{A}\Psi \rangle = \langle \hat{A}^*\Theta, \Psi \rangle. \quad (4.39)$$

## Hermitikus operátorok

Láttuk, hogy egy kvantummechanikai állapotban a fizikai mennyiségeknek a hullámfüggvénnyel számított átlagértéke lényeges mennyiség, amely kísérletek során is mérhető. Minden, ami fizikailag mérhető, az valós érték kell hogy legyen, tehát a kvantummechanikában használt (fizikai mennyiségekhez rendelt) operátorok átlagértéke valós mennyiség kell legyen:

$$\langle A \rangle \in \mathbb{R}; \quad \langle A \rangle = \frac{\langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \frac{\int_{\{\xi'\}} \Psi^*(\xi) \hat{A}\Psi(\xi) d\xi}{\int_{\{\xi'\}} \Psi^*(\xi) \Psi(\xi) d\xi}. \quad (4.40a)$$

Az, hogy  $\langle A \rangle$  valós, matematikailag azzal ekvivalens, hogy:  $\langle A \rangle = \langle A \rangle^*$ .

$$\langle A \rangle^* = \frac{\langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle^*}{\langle \Psi, \Psi \rangle^*} = \frac{\langle \hat{A}\Psi, \Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle}. \quad (4.40b)$$

Itt felhasználtuk a skaláris szorzat tulajdonságait. A (4.40a) és (4.40b) egyenletek egyenlőségéből következik, hogy a kvantummechanikában használt operátorokra nézve mindig igaz kell legyen, hogy:

$$\langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle = \langle \hat{A}\Psi, \Psi \rangle. \quad (4.41)$$

Mi ennél a feltételnél erősebb feltételt követelünk meg, azt, hogy a kvantummechanikában *minden valós fizikai mennyiséghez hermitikus operátort kell rendelni*. (Az erősebb feltétel azt jelenti, hogy minden hermitikus operátorra teljesül az előbb levezetett (4.41) feltétel, de ez az előbbi feltétel még nem követeli meg egy operátortól, hogy hermitikus legyen.) A hermitikus operátor olyan operátor, amelyre igaz, hogy:

$$\langle \Psi, \hat{A}\Phi \rangle = \langle \hat{A}\Psi, \Phi \rangle, \quad \forall \Psi, \Phi \in L_2. \quad (4.42)$$

A hermitikus operátorokra tehát igaz, hogy önmaguk adjungáltjai, ezért úgy is nevezzük őket, hogy *önadjungált operátorok*. A  $\frac{\partial}{\partial x}$  operátor például egy hermitikus operátor.

## 4.5 Sajátértékek, sajátfüggvények

### Definíciók:

Tekintsük az  $\hat{A}$  hermitikus operátort és a következő egyenlőséget:

$$\hat{A}\Psi = c\Psi. \quad (4.43)$$

A fenti egyenlőséget teljesítő  $\Psi$  függvényt az  $\hat{A}$  operátor *sajátfüggvényének* (*sajátvektornak*) nevezzük, a  $c \in \mathbb{R}$  konstans pedig a  $\Psi$  sajátfüggvényhez tartozó *sajátértéknek*. A (4.43) egyenlet az  $\hat{A}$  operátor *sajátérték-egyenlete*.

Egy adott sajátértékhez több lineárisan független sajátfüggvény is tartozhat. Ebben az esetben azt mondjuk, hogy az illető *sajátérték elfajult*, és definiálható az *elfajulási fok*, amely megadja, hogy az illető sajátértékhez hány lineárisan független sajátfüggvény tartozik.

A következőkben két nagyon fontos tételt bizonyítunk be a sajátértékekre és sajátfüggvényekre vonatkozóan.

Tétel: Egy hermitikus operátor sajátértékei mind valósak.

A tétel bizonyítása egyszerű. Abból indulunk ki, hogy:

$$\hat{A}\Psi_a = a\Psi_a. \quad (4.44)$$

A hullámfüggvényt  $\Psi_a$ -val jelöljük, kihangsúlyozva azt, hogy ez a sajátfüggvény az  $a$  sajátértékhez tartozik. Az átlagértékeknél tanultak értelmében:

$$\frac{\langle \Psi_a, \hat{A}\Psi_a \rangle}{\langle \Psi_a, \Psi_a \rangle} = \langle A \rangle. \quad (4.45)$$

Láttuk, hogy a hermitikus operátorok átlagértéke valós, vagyis:  $\langle A \rangle \in \mathbb{R}$ .

Felhasználva a (4.44) összefüggést:

$$\langle \Psi_a, \hat{A}\Psi_a \rangle = \langle \Psi_a, a\Psi_a \rangle = a\langle \Psi_a, \Psi_a \rangle = a, \quad (4.46)$$

$$\Rightarrow a = \frac{\langle \Psi_a, \hat{A}\Psi_a \rangle}{\langle \Psi_a, \Psi_a \rangle} = \langle A \rangle \in \mathbb{R}. \quad (4.47)$$

Tétel: Ha  $\hat{A}$  egy hermitikus operátor, akkor a különböző sajátértékekhez tartozó sajátfüggvények ortogonálisak egymásra.

Bizonyítás. Legyen  $a_1$  és  $a_2$  két különböző sajátérték, és  $\Psi_1$  meg  $\Psi_2$  az ehhez tartozó sajátfüggvények:

$$\hat{A}\Psi_1 = a_1\Psi_1;$$

$$\hat{A}\Psi_2 = a_2\Psi_2; a_1 \neq a_2. \quad (4.48)$$

Két azonnali egyenlet írható fel:

$$\langle \Psi_2, \hat{A}\Psi_1 \rangle = a_1 \langle \Psi_2, \Psi_1 \rangle; \quad (4.49)$$

$$\langle \hat{A}\Psi_2, \Psi_1 \rangle = a_2^* \langle \Psi_2, \Psi_1 \rangle = a_2 \langle \Psi_2, \Psi_1 \rangle. \quad (4.50)$$

A két egyenletet kivonva egymásból:

$$0 = (a_2 - a_1) \langle \Psi_2, \Psi_1 \rangle \Rightarrow \langle \Psi_2, \Psi_1 \rangle = 0. \quad (4.51)$$

Megjegyzés. Abban az esetben, ha több olyan sajátfüggvényt nézünk, amelyek ugyanahhoz a sajátértékhez tartoznak (elfajult sajátértékek esete), nem tudjuk a fenti eljáráshoz hasonlóan igazolni azt, hogy ezek a sajátfüggvények merőlegesek egymásra – és általános esetben nem is azok. Ezen függvények lineáris kombinációjával azonban olyan függvényrendszer is kapható, amelynek tagjai páronként merőlegesek egymásra. A módszer, amivel ez elérhető, az úgynevezett *Gramm–Schmidt-féle ortogonalizálás*. (Ezzel az eljárással az olvasó talán már találkozott 3D vektorok esetén.) Fontos megjegyezni, hogy ez az eljárás azért alkalmazható, mert ezek a sajátfüggvények, még ha nem is merőlegesek egymásra, de minden esetben lineárisan függetlenek egymástól.

### Gramm–Schmidt-féle ortogonalizálási eljárás

Legyen egy  $a$  elfajult sajátértékünk, és  $\Psi_a^i$  a hozzá tartozó lineárisan független sajátfüggvények:  $\hat{A}\Psi_a^i = a\Psi_a^i$  (az  $i$  indexeli az elfajult sajátértékhez tartozó különböző sajátfüggvényeket). A  $\Psi_a^i$  sajátfüggvények helyett bevezethetjük ezeknek egy,  $\varphi_a^i$  lineáris kombinációit:

$$\Psi_a^i \longrightarrow \varphi_a^i = \sum_{j=1}^F d_j^i \Psi_a^j; \quad (4.52)$$

ahol  $F$  az elfajulási fok. A  $\varphi_a^i$  függvények szintén sajátfüggvényei az  $\hat{A}$  operátornak:

$$\hat{A}\varphi_a^i = \hat{A} \left[ \sum_{j=1}^F d_j^i \Psi_a^j \right] = \sum_{j=1}^F d_j^i \hat{A}\Psi_a^j = \sum_{j=1}^F d_j^i a\Psi_a^j = a \sum_{j=1}^F d_j^i \Psi_a^j = a\varphi_a^i, \quad (4.53)$$

és szintén az  $a$  sajátértékhez tartoznak. Ahhoz, hogy ezen új  $\varphi_a^j$  sajátfüggvények egymásra páronként merőlegesek legyenek, a következő módon szerkesztjük meg őket:

$$c_1 \varphi_a^1 = \Psi_a^1; \quad (4.54)$$

$$c_j \varphi_a^j = \Psi_a^j - \sum_{i=1}^{j-1} \varphi_a^i \langle \varphi_a^i, \Psi_a^j \rangle. \quad (4.55)$$

Az első függvénnyel a szerkesztés tehát csak annyit tesz, hogy normálja a  $\Psi_a^1$  értékét: a  $c_1$ -et úgy határozzuk meg, hogy  $\langle \varphi_a^1, \varphi_a^1 \rangle = 1$ . Kövessük végig most a szerkesztést az első lépéstől, és győződjünk meg, hogy az így kapott sajátfüggvények tényleg ortonormáltak lesznek. Tekintsük most a  $\varphi_a^2$ -et:

$$c_2 \varphi_a^2 = \Psi_a^2 - \varphi_a^1 \langle \varphi_a^1, \Psi_a^2 \rangle. \quad (4.56)$$

$\langle \varphi_a^1, c_2 \varphi_a^2 \rangle = 0$  eredményt kapunk a szerkesztés után, ugyanis:

$$\langle \varphi_a^1, c_2 \varphi_a^2 \rangle = \langle \varphi_a^1, \Psi_a^2 \rangle - \langle \varphi_a^1, \varphi_a^1 \rangle \langle \varphi_a^1, \Psi_a^2 \rangle = 0. \quad (4.57)$$

A  $c_2$  konstans most úgy határozzuk meg, hogy  $\varphi_a^2$  normált legyen. A következő lépésként meghatározzuk  $\varphi_a^3$ -t:

$$c_3 \varphi_a^3 = \Psi_a^3 - \varphi_a^1 \langle \varphi_a^1, \Psi_a^3 \rangle - \varphi_a^2 \langle \varphi_a^2, \Psi_a^3 \rangle, \quad (4.58)$$

amiről kimutatható, hogy merőleges  $\varphi_a^2$  és  $\varphi_a^1$ -re.

Szemléletesen, a szerkesztés háromdimenziós vektorok esetén úgy működik, hogy kiindulunk olyan vektorokból, amelyek nem merőlegesek egymásra (legyen kiindulópontjuk közös), de mind más egyeneseken fekszenek, és lineárisan függetlenek egymástól (háromdimenzióban maximálisan csak három ilyen vektor lehet). Tekintsük az első vektort, ezt elosztjuk a hosszával, hogy egységvektor legyen belőle. A második vektort helyettesítjük egy olyan vektorral amely az első vektorra merőleges. Ezt úgy érjük el, hogy kivonjuk belőle az első vektorra vett vetületét. Az eredményként kapott vektor merőleges lesz az elsőre. Az így kapott vektort is elosztjuk a saját hosszával, hogy egységvektor legyen belőle. A harmadik vektorból kivonjuk az első két vektor által meghatározott síkra vett vetületét. Az így kapott vektorunk mindkét előbbi vektorra merőleges lesz. Ezt is normálva megvan az ortonormált bázisunk háromdimenzióban.

### További fontos tételek a sajátfüggvényekre és sajátértékekre nézve

Tétel: Legyen  $A$  egy fizikai mennyiség, és a kvantummechanikai rendszerünk legyen a  $\Psi$  hullámfüggvénnyel jellemzett állapotban. Ha ebben a kvantummechanikai állapotban az  $A$  mennyiséget sokszor megmérve mindig ugyanazt az értéket kapjuk, vagyis a  $\Psi$  állapotban  $A$  értéke jól meghatározott, akkor a  $\Psi$  az  $\hat{A}$  operátor sajátfüggvénye kell hogy legyen. A tétel fordítva is igaz.

Bizonyítsuk a tételt először direkt irányban. Azt a tényt, hogy  $A$  értéke jól meghatározott, matematikailag úgy tudjuk felírni, hogy az  $A$  mérési eredményeinek szórása nulla ( $\Delta A = 0$ ). Azt akarjuk bizonyítani tehát, hogy  $\hat{A}\Psi = c\Psi$ , ha  $\Delta A = 0$ . Azonnal következnek az alábbi egyenletek:

$$\Delta A^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = 0; \quad (4.59)$$

$$\langle A \rangle^2 = \frac{\langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle^2}, \quad \langle A^2 \rangle = \frac{\langle \Psi, \hat{A}^2\Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle}; \quad (4.60)$$

$$\frac{\langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle^2} = \frac{\langle \Psi, \hat{A}^2\Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle} \rightarrow \frac{\langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle^2} = \frac{\langle \hat{A}\Psi, \hat{A}\Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle}. \quad (4.61)$$

A fenti képlet alapján

$$\langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle^2 = \langle \hat{A}\Psi, \hat{A}\Psi \rangle \langle \Psi, \Psi \rangle, \quad (4.62)$$

és mivel  $\langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle^2$  valós mennyiség, azonnal adódik:

$$\left| \langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle \right|^2 = \langle \hat{A}\Psi, \hat{A}\Psi \rangle \langle \Psi, \Psi \rangle. \quad (4.63)$$

Tudjuk a Schwartz-féle egyenlőtlenség alapján, hogy  $\left| \langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle \right|^2 \leq \langle \hat{A}\Psi, \hat{A}\Psi \rangle \langle \Psi, \Psi \rangle$  és az egyenlőség csak akkor áll fenn, hogy ha  $\hat{A}\Psi = c\Psi$ , vagyis  $\Psi$  az  $\hat{A}$  operátor sajátfüggvénye. Direkt irányban ezáltal igazoltuk is a tételt. Mivel a bizonyításban minden felhasznált lépés ekvivalencialépés volt, ez a tétel visszafelé is érvényes, vagyis: ha  $\hat{A}\Psi = c\Psi$  akkor  $A$  értéke jól meghatározott a  $\Psi$  kvantummechanikai állapotban, és azonnal belátható, hogy  $\langle A \rangle = c$ .

Tétel: Ha  $\hat{A}$  egy megfigyelhető valós fizikai mennyiséghez rendelt hermitikus operátor, akkor ezen operátor sajátfüggvényeiből egy ortonormált bázis képezhető a hullámfüggvények Hilbert-terén.

Az előbbiekből azt már láttuk, hogy ortonormált hullámfüggvényeket tudunk készíteni a sajátvektorokból, még csak azt kell belátni, hogy erre a függvénysokaságra igaz a teljességi feltétel is. Ezt a részét a tételnek itt nem bizonyítjuk. Megjegyezzük, hogy van olyan tárgyalásmódja a kvantummechanikának, ahol megfigyelhető mennyiségnek azt nevezzük, amelyhez rendelt operátor sajátfüggvényeinek a halmaza teljes, ilyen esetben akkor ez a kijelentésünk nem tétel, hanem definíció.

## 4.6 Mérési eredmények eloszlása

Tételezzük fel, hogy az  $A$  fizikai mennyiséget mérjük. Az  $A$  fizikai mennyiséghez rendelt  $\hat{A}$  operátornak a sajátértékei diszkrét vagy folytonos halmazt alkothatnak. Attól függően, hogy a kvantummechanikai rendszerünk milyen kvantummechanikai állapotban van, az adott állapotban megismételt mérési eredményeinknek más és más eloszlása lesz. A következőkben a mérési eredmények eloszlását tanulmányozzuk, külön tárgyalva azokat az eseteket, amikor az  $\hat{A}$  operátor sajátértékeinek a halmaza diszkrét, és amikor folytonos.

### 4.6.1 Diszkrét sajátértékspektrumok esete

Az előbbieken bizonyított tétel értelmében, ha a kvantummechanikai rendszer az  $\hat{A}$  operátor egy sajátállapotában van, akkor a mérés eredménye mindig az adott sajátállapothoz tartozó sajátérték lesz:

$$\hat{A}\varphi = a\varphi \rightarrow \text{a mérési eredmény mindig } a. \quad (4.64)$$

Ha a kvantummechanikai rendszer nem az  $\hat{A}$  operátor egy sajátállapotában van, akkor a különböző mérések eredményeképpen különböző értékeket kaphatunk az  $A$  fizikai mennyiségre, annak ellenére, hogy minden mérés után a kvantummechanikai rendszert visszaállítjuk eredeti állapotába! Érdekelnek bennünket a mérés lehetséges eredményei, és ezeknek az eloszlása, vagyis, hogy a lehetséges mérési eredmények milyen valószínűségekkel jelentkeznek. A feladatra való válaszuk érdekében hasznos lesz az átlagérték fogalma, amit már előbb bevezettünk. Legyen a kvantummechanikai rendszerünk a  $\Psi$  hullámfüggvénnyel jellemzett állapotban. Ebben az esetben:

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle}. \quad (4.65)$$

Kifejtve  $\Psi$ -t a sajátfüggvények bázisában:

$$\langle A \rangle = \frac{\left\langle \sum_n c_n \varphi_n, \hat{A} \sum_k c_k \varphi_k \right\rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \frac{\sum_n \sum_k c_n^* c_k \langle \varphi_n, \hat{A} \varphi_k \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \frac{\sum_n \sum_k c_n^* c_k a_k \langle \varphi_n, \varphi_k \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle} \quad (4.66)$$

Mivel a bázis ortonormált ( $\langle \varphi_n, \varphi_m \rangle = \delta_{nm}$ ):

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_n \sum_k c_n^* c_k a_k \delta_{nk}}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \frac{\sum_n |c_n|^2 a_n}{\langle \Psi, \Psi \rangle}. \quad (4.67)$$

A Parseval-egyenlőség alapján tudjuk, hogy:

$$\frac{\sum_n |c_n|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = 1. \quad (4.68)$$

Ennek alapján a  $\frac{|c_n|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle}$  tagok felfoghatók egy esemény összes lehetséges  $P_n$  kimeneteli valószínűségeiként. Ezt az értelmezést elfogadva:

$$\langle A \rangle = \sum_n P_n a_n \quad (4.69)$$

$$P_n = \frac{|c_n|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \frac{|\langle \varphi_n, \Psi \rangle|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle}; \text{ és } \sum_n P_n = 1. \quad (4.70)$$

A fenti képleteket a következőképpen értelmezhetjük:

1. Az  $A$  fizikai mennyiség mérése során mérési eredményként mindig az  $\hat{A}$  operátor egyik lehetséges sajátértékét ( $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$ ) kapjuk.
2. Annak a valószínűsége, hogy a mérés eredménye  $a_i$  legyen az  $P_i$ , ahol:

$$P_i = \frac{|c_i|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \frac{|\langle \varphi_i, \Psi \rangle|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle}. \quad (4.71)$$

Ha a kvantummechanikai rendszerünk egy sajátállapotban van, akkor csak egyetlenegy  $P_i$  lesz nullától különböző, és ez egyenlő kell legyen eggyel, ezért mindig ugyanazt az  $a_i$  értéket mérjük.

#### 4.6.2 Folytonos sajátértékhalmoz

A fizikában a diszkrét esetről a folytonosra általában úgy térünk át, hogy az összegzést integrállal helyettesítjük. Meglátjuk, hogy formailag most is így lesz, de problémák és nem várt nehézségek is adódhatnak.

Legyen az  $\hat{A}$  operátorunk sajátértékeinek halmaza folytonos, és a hullámfüggvény változóinak a sokaságát jelöljük egyszerűen  $\xi$ -vel:

$$\hat{A}\varphi(\xi, a) = a\varphi(\xi, a). \quad (4.72)$$

A sajátfüggvények folytonos spektrumot alkotnak, ezért nem lehet egyszerűen indexelni, hanem a függvény változóként tartalmazza a folytonos  $a$  sajátértéket is. A legnagyobb probléma a folytonos sajátértékhalmoz esetén az, hogy:  $\varphi(\xi, a) \notin L_2$ , általában nem négyzetesen integrálható. Ilyenkor komplikáltabb lesz a hullámfüggvények tere és az ebben definiálható bázis is. Erre jó példa az impulzus operátor

$$A = p_x;$$

$$p_x \rightarrow \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad (4.73)$$

melynek sajátérték-egyenlete:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x) = p_x \varphi(x). \quad (4.74)$$

Ez egy szétválasztható differenciálegyenlet:

$$\frac{d\varphi(x)}{\varphi(x)} = \frac{i}{\hbar} p_x dx; \rightarrow \varphi(x) = ce^{\frac{i}{\hbar} p_x x}. \quad (4.75)$$

A megoldásként kapott függvények nem négyzetesen integrálhatók. A  $p_x$  értékére nem kaptunk semmi megszorító feltételt, így a  $p_x$  sajátértékek bármely valós értéket felvehetnek. A sajátfüggvények segítségével azonban ebben az esetben is „reprezentálni” tudunk bármely hullámfüggvényt az  $L_2$ -ből. A diszkrét esettel analóg módon, bármely  $\Psi \in L_2$  hullámfüggvényre felírhatjuk:

$$\Psi(\xi) = \int_{\{a\}} c(a) \varphi(\xi, a) da. \quad (4.76)$$

Ez majdnem olyan, mint egy bázis szerinti kifejtés, de ebben az esetben a  $\varphi(\xi, a)$  függvények nem alkotnak bázist, ugyanis ezek a függvények nem elemei a hullámfüggvények Hilbert-terének. Azt szeretnénk, hogy a  $c(a)$  értékeket hasonló módon tudjuk megkapni, mint diszkrét esetben, vagyis:

$$c(a) = \langle \varphi(\xi, a), \Psi(\xi) \rangle. \quad (4.77)$$

Ennek a szükséges feltételét azonnal megkapjuk, ha (4.77)-be visszahelyettesítjük a hullámfüggvény (4.76) alakját:

$$c(a) = \langle \varphi(\xi, a), \Psi(\xi) \rangle = \left\langle \varphi(\xi, a), \int_{\{a'\}} c(a') \varphi(\xi, a') da' \right\rangle; \quad (4.78)$$

$$c(a) = \int_{\{\xi\}} \varphi^*(\xi, a) \left[ \int_{\{a'\}} c(a') \varphi(\xi, a') da' \right] d\xi = \int_{\{a'\}} c(a') \left[ \int_{\{\xi\}} \varphi^*(\xi, a) \varphi(\xi, a') d\xi \right] da'$$

$$\Rightarrow \int_{\{\xi\}} \varphi^*(\xi, a) \varphi(\xi, a') d\xi = \delta(a - a'). \quad (4.79)$$

Ez az általánosított ortonormalálási feltétel a  $\varphi(\xi, a)$  sajátfüggvényekre, a diszkrét esetből ez a  $\langle \varphi_n, \varphi_k \rangle = \delta_{nk}$  egyenletnek az analógja. A (4.79) egyenlet értelmében a különböző sajátértékekhez tartozó sajátfüggvények egymásra merőlegesek.

A (4.77) egyenletet behelyettesítve a (4.76)-be, egy újabb fontos egyenlőséget kapunk, aminek teljesülnie kell ahhoz, hogy a (4.76) és (4.77) egyenletek igazak legyenek:

$$\Psi(\xi) = \int_{\{a\}} \langle \varphi(\xi, a), \Psi(\xi) \rangle \varphi(\xi, a) da = \int_{\{a\}} \int_{\{\xi'\}} \varphi^*(\xi', a) \Psi(\xi') d\xi' \varphi(\xi, a) da =$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{\{\xi'\}} \Psi(\xi') \left[ \int_{\{a\}} \varphi^*(\xi', a) \varphi(\xi, a) da \right] d\xi' \\
&\Rightarrow \int_{\{a\}} \varphi^*(\xi', a) \varphi(\xi, a) da = \delta(\xi - \xi'). \quad (4.80)
\end{aligned}$$

A (4.80) egyenlet a teljességi feltétel folytonos spektrum esetén. Ennek a megfelelője diszkrét spektrumoknál az volt, hogy:  $\sum_{i=1}^{\infty} \varphi_i^*(\xi) \varphi_i(\xi') = \delta(\xi - \xi')$ .

Lássuk most, hogyan írható fel egy fizikai mennyiség átlagértéke a folytonos spektrum esetében:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{A} \rangle &= \frac{\langle \Psi, \hat{A} \Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \frac{\left\langle \left[ \int_{\{a\}} c(a) \varphi(\xi, a) da \right], \hat{A} \left[ \int_{\{a'\}} c(a') \varphi(\xi, a') da' \right] \right\rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \\
&= \frac{\int_{\{a\}} \int_{\{a'\}} c^*(a) c(a') \int_{\{\xi\}} \varphi^*(\xi, a) \hat{A} \varphi(\xi, a') d\xi da da'}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \\
&= \frac{\int_{\{a\}} \int_{\{a'\}} c^*(a) c(a') a' \int_{\{\xi\}} \varphi^*(\xi, a) \varphi(\xi, a') d\xi da da'}{\langle \Psi, \Psi \rangle} \Rightarrow \\
\langle A \rangle &= \frac{\int_{\{a\}} \int_{\{a'\}} c^*(a) c(a') a' da da' \delta(a - a')}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \frac{\int_{\{a\}} c^*(a) c(a) a da}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \frac{\int_{\{a\}} |c(a)|^2 a da}{\langle \Psi, \Psi \rangle} \quad (4.81)
\end{aligned}$$

$$\langle A \rangle = \frac{\int_{\{a\}} |c(a)|^2 a da}{\langle \Psi, \Psi \rangle}. \quad (4.82)$$

A (4.82) egyenlet megfelelője diszkrét esetben a  $\langle A \rangle = \frac{\sum_n |c_n|^2 a_n}{\langle \Psi, \Psi \rangle}$  egyenlőség volt. Azonnal bebizonyítható, hogy a folytonos spektrum esetén is létezik a Parseval-egyenlőségnek megfelelő egyenlet, amelynek alakja most:

$$\frac{\int_{\{a\}} |c(a)|^2 da}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = 1 \quad (4.83)$$

A (4.82) képletet hasonló módon értelmezhetjük, mint a diszkrét spektrum esetén. Az  $A$  fizikai mennyiség mérése során ilyenkor tetszőleges  $a$  értéket

mérhetünk, és annak a valószínűsége, hogy a mért mennyiség értéke  $a$  és  $a+da$  között legyen:

$$P(a, a+da) = |c(a)|^2 da, \text{ amennyiben } \langle \Psi, \Psi \rangle = 1. \quad (4.84)$$

A  $c(a) = \langle \varphi(\xi, a), \Psi(\xi) \rangle$  függvényt tehát úgy értelmezhetjük, mint az  $A$  mennyiség terében való hullámfüggvényt!

Példa: az *impulzustérbeli hullámfüggvény egydimenziós mozgás esetén*. Legyen az egydimenziós kvantummechanikai rendszerünk a  $\Psi(x, t)$  koordinátatérbeli hullámfüggvénnyel jellemzett állapotban. Az impulzushoz rendelt operátor sajátfüggvényei azonnal megkaphatók:

$$p_x \rightarrow \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; \quad (4.85)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x, p_x) = p_x \varphi(x, p_x) \Rightarrow \varphi(x, p_x) = c e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}. \quad (4.86)$$

Ahhoz, hogy a tárgyalt (4.82), (4.84) eredményeket alkalmazhassuk, a  $\varphi(x, p_x)$  sajátfüggvényekre igaz kell legyen az, hogy:

$$\int_{\{x\}} \varphi^*(x, p_x) \varphi(x, p_x') dx = \delta(p_x - p_x'); \quad (4.87)$$

$$\int_{\{p_x\}} \varphi^*(x, p_x) \varphi(x', p_x) dp_x = \delta(x - x'). \quad (4.88)$$

A fenti két képletet megvizsgálva és a Dirac-funkcionál tulajdonságait felhasználva:

$$\begin{aligned} \int_{\{x\}} \varphi^*(x, p_x) \varphi(x, p_x') dx &= \int_{\{x\}} c^* e^{-\frac{i}{\hbar} x p_x} c e^{\frac{i}{\hbar} x p_x'} dx = \\ &= |c|^2 \int_{\{x\}} e^{\frac{i}{\hbar} x (p_x' - p_x)} dx = 2\pi |c|^2 \delta\left(\frac{p_x - p_x'}{\hbar}\right) = 2\pi |c|^2 \hbar \delta(p_x - p_x') = \delta(p_x - p_x'). \end{aligned} \quad (4.89)$$

$\Rightarrow 2\pi |c|^2 \hbar = 1$ , és ha kikötjük, hogy  $c$  valós, akkor:

$$c = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \quad (4.90)$$

Egy fázistag erejéig megkaptuk tehát az impulzusoperátor sajátfüggvényeit. Megjegyezzük, hogy a fenti képletekben felhasználtuk a Dirac-funkcionál következő tulajdonságait:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\{x\}} e^{ikx} dx = \delta(k) \text{ és } \delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x). \quad (4.91)$$

Azonnal belátható, hogy a (4.88) teljességi feltétel is teljesül a (4.90) képletben levő  $c$  normálási konstanssal. Azt kapjuk tehát, hogy:

$$\varphi(x, p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}. \quad (4.92)$$

A (4.76) értelmében a  $\Psi(x, t)$  hullámfüggvény kifejezhető a (4.92) sajátfüggvények szerint. A kifejtési együtthatók

$$\Phi(p_x, t) = \langle \varphi(x, p_x), \Psi(x, t) \rangle = \int_{\{x\}} \varphi^*(x, p_x) \Psi(x, t) dx, \quad (4.93)$$

$$\Phi(p_x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\{x\}} \Psi(x, t) e^{-\frac{i}{\hbar} p_x x} dx, \quad (4.94)$$

megadják az impulzustérbeli hullámfüggvényt. Ezennel bebizonyítottuk a már korábban ismertetett összefüggést a koordinátatérbeli és impulzustérbeli hullámfüggvények között. Megfordítva, a

$$\Psi(\xi) = \int_{\{a\}} c(a) \varphi(\xi, a) da$$

alkalmazásával azonnal igazolható az inverz transzformációs képlet is:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\{p_x\}} \Phi(p_x, t) e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} dp_x. \quad (4.95)$$

#### 4.6.3 Általános eset – diszkrét és folytonos spektrumok közös esete

Általános esetben a diszkrét és folytonos sajátértékspektrum együtt jelentkezik. Bizonyos intervallumokon folytonosak a sajátértékek, más intervallumokon diszkréték. Ilyenkor a tárgyalásba mindkét esetet be kell venni:

$$A \rightarrow \hat{A}; \quad \hat{A} \varphi_n = a_n \varphi_n, \quad \varphi_n \in L_2, \quad (4.96)$$

$$\hat{A} \varphi(\xi, a) = a \varphi(\xi, a); \quad \varphi(\xi, a) \notin L_2. \quad (4.97)$$

Tetszőleges kvantummechanikai állapotbeli hullámfüggvény felírható mint

$$\Psi = \sum_n c_n \varphi_n + \int_{\{a\}} c(a) \varphi(\xi, a) da, \quad (4.98)$$

ahol

$$c_n = \langle \varphi_n, \Psi \rangle. \quad (4.99)$$

$$c(a) = \langle \varphi(\xi, a), \Psi \rangle \quad (4.100)$$

Ahhoz, hogy a fenti feltételek mellett a (4.98) felírasmód igaz legyen, teljesülnie kell az általánosított ortonormálási feltételeknek

$$\langle \varphi_n, \varphi_m \rangle = \delta_{nm}, \quad (4.101)$$

$$\int_{\{\xi\}} \varphi^*(\xi, a) \varphi(\xi, a') d\xi = \delta(a - a'), \quad (4.102)$$

és a teljességi feltételnek:

$$\sum_n \varphi_n(\xi) \varphi_n(\xi') + \int_{\{a\}} \varphi^*(\xi, a) \varphi(\xi', a) da = \delta(\xi - \xi'). \quad (4.103)$$

Ugyanakkor igaz (bizonyítható) az általánosított Parseval-összefüggés:

$$\sum_n |c_n|^2 + \int_{\{a\}} |c(a)|^2 da = \langle \Psi, \Psi \rangle. \quad (4.104)$$

A fentiek figyelembevételével kiszámítható az  $A$  fizikai mennyiség átlagértéke a  $\Psi$  hullámfüggvénnyel jellemzett kvantummechanikai állapotban:

$$\langle A \rangle = \sum_n \frac{|c_n|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle} a_n + \int_{\{a\}} \frac{|c(a)|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle} a da. \quad (4.105)$$

A fenti képletet hasonlóan értelmezhetjük, mint ahogy a diszkrét és folytonos spektrumok esetén tettük. Ha  $\langle \Psi, \Psi \rangle = 1$ , akkor  $|c_n|^2$  megadja annak a valószínűségét, hogy a mért  $A$  érték  $a_n$  legyen, és  $|c(a)|^2 da$  annak a valószínűségét adja, hogy  $a$  értéke az  $a$  és  $a+da$  között a folytonos spektrumban legyen.

#### 4.7 Javasolt feladatok

1. Legyen két tetszőleges  $\Psi_1, \Psi_2 \in L_2$  Hilbert-térbeli hullámfüggvény.

Bizonyítsuk be a Cauchy–Schwarz–Bunyakovszky-egyenlőtlenséget:

$$|\langle \Psi_1, \Psi_2 \rangle|^2 \leq \langle \Psi_1, \Psi_1 \rangle \langle \Psi_2, \Psi_2 \rangle.$$

Igazoljuk, hogy az egyenlőség csak akkor igaz, ha  $\Psi_1, \Psi_2$  egymástól lineárisan nem független.

2. Tekintsük a  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$  operátort, amely azon folytonos és deriválható  $\varphi(x)$

függvények terén hat, melyek az értelmezési tartomány határain nullához konvergálnak. Bizonyítsuk be, hogy  $\hat{p}$  lineáris és hermitikus operátor.

3. Igazoljuk, hogy az

$$\hat{A} \varphi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(x \cdot y) \varphi(y) dy$$

operátor lineáris és hermitikus az  $L_2$ -n, ha az  $F(z)$  függvény valós.

4. Tekintsünk két  $A$  és  $B$  fizikai mennyiséget, amelyekhez rendelt hermitikus operátoroknak két lehetséges elfajulatlan sajátértéke van. Az  $\hat{A}$  operátor sajátértékei legyenek  $a_1$  és  $a_2$ , a hozzájuk tartozó normált sajátfüggvényeket jelöljük  $\Psi_1$  és  $\Psi_2$ -vel. Tételezzük most fel, hogy a  $\hat{B}$  operátor sajátértékei  $b_1$ ,

illetve  $b_2$ , és a hozzájuk tartozó sajátfüggvények  $\frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 + \Psi_2)$  és  $\frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 - \Psi_2)$ .

a) Ha a  $\Psi_1$  illetve  $\Psi_2$  állapotokban megmérjük az  $A$  vagy  $B$  fizikai mennyiséget, milyen mérési eredményt várunk?

b) Számítsuk ki az  $A$  és  $B$  várható (átlag) értékét a az  $\hat{A}$  és  $\hat{B}$  operátorok sajátállapotaiban.

c) Igazoljuk, hogy a  $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$  normált hullámfüggvénnyel jellemzett állapotban  $\langle A \rangle_\Psi = \langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle$ .

## 5. FEJEZET

### Kompatibilis és komplementáris fizikai mennyiségek

Ebben a fejezetben részletesen foglalkozunk a mérési folyamattal a kvantummechanikában, illetve azzal a kérdéssel, hogy mi történik, ha egymás után több fizikai mennyiséget mérünk meg egy adott kvantummechanikai állapotból kiindulva. Tárgyaljuk a kompatibilis és komplementáris fizikai mennyiségek jelentését, és bebizonyítjuk általános esetben a határozatlansági összefüggéseket. Speciális esetként visszakapjuk a híres Heisenberg-féle határozatlansági összefüggéseket.

#### 5.1 A mérési posztulátum

Láttuk, hogy amennyiben a kvantummechanikai rendszerünk egy  $A$  fizikai mennyiséghez rendelt operátor sajátállapotában van, akkor ebben az állapotban  $A$  értéke egzaktul mérhető. Azt is megtanultuk, hogy ha a kvantummechanikai rendszer nincs az  $A$ -hoz rendelt operátor valamely sajátállapotában, a méréseink eredménye akkor is csak az  $\hat{A}$  operátor valamely sajátértéke lehet. A mérési eredmények eloszlásánál alkalmazott értelmezésünket megfogalmazhatjuk egy posztulátum formájában. Ez a *mérési posztulátum* azt is kijelenti, hogy mi történik a kvantummechanikai rendszerrel a mérési folyamat után.

A mérési posztulátum:

**Ha a  $\psi$  hullámfüggvénnyel jellemzett kvantummechanikai állapotban az  $A$  fizikai mennyiséget mérjük, a mérésünk eredménye mindig az  $\hat{A}$  operátor egy lehetséges  $a_n$  sajátértéke lesz ( $\hat{A}\varphi_n = a_n\varphi_n$ ). A mérés után a kvantummechanikai rendszer átmegy az  $a_n$  sajátértéknek megfelelő  $\varphi_n$  tiszta vagy kevert állapotba.** (Hamarosan tisztázzuk, mit értünk tiszta és kevert állapotokon.)

Itt megemlíti, hogy diszkrét sajátértékspektrumok esetén megtanultuk azt is, hogy annak a  $P_n$  valószínűsége, hogy az  $a_n$  sajátértéket kapjuk a mérés eredményeként:

$$P_n = \frac{|c_n|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \frac{|\langle \varphi_n, \Psi \rangle|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle}, \text{ ahol: } \Psi = \sum_n c_n \varphi_n$$

A mérési posztulátum egyik azonnali következménye: ha egyszer megmértük az  $A$  fizikai mennyiséget, akkor az  $A$  mennyiség további mérése (az eredményül kapott kvantummechanikai állapotban) mindig ugyanazt az értéket fogja eredményezni. Ezért, ha egy kvantummechanikai állapotban az  $A$  fizikai mennyiség átlagértékét akarjuk mérni, akkor a mérés előtt mindig vissza kell állítani a rendszert a kiinduló kezdeti állapotba.

Tisztázzuk most, mit is értünk *tiszta*, illetve *kevert* állapotokon:

**Tiszta állapot:** Tiszta állapotban olyan állapotot értünk, amelyhez egy jól meghatározott hullámfüggvény tartozik. Ha az  $A$  fizikai mennyiség mérése során kapott  $a_n$  sajátérték nem elfajult, akkor a mérés után a kvantummechanikai rendszer egy tiszta állapotba kerül.

**Kevert állapot:** Kevert állapotban a Hilbert-térnek egy egynél nagyobb dimenziós alhalmazát értjük, amelyben a hullámfüggvény alakja nem jól meghatározott. A  $\Gamma \subset L_2$  egynél nagyobb dimenziós altér tehát kevert állapotot jelenthet. Ha az  $A$  fizikai mennyiség mérése során kapott  $a_n$  sajátérték elfajult, a kvantummechanikai rendszer kevert állapotba kerül. Ezt a kevert állapotot az elfajult sajátértékhez tartozó sajátvektorok generálják.

## 5.2 Kompatibilis fizikai mennyiségek

Két  $A$  és  $B$  fizikai mennyiség *kompatibilis*, ha egy tetszőleges kvantummechanikai állapotból kiindulva egymásután sokszor megmérve őket ( $A, B, A, B, \dots$ ), az  $A$ -ra és  $B$ -re kapott mérési eredmény mindig ugyanaz lesz. Ezt a tényt úgy szoktuk megfogalmazni, hogy  $A$  és  $B$  egyszerre és egzaktul mérhető, vagyis az egymásutáni sorozatos mérések nem változtatják meg az  $A$ -ra és  $B$ -re kapott értéket.

Egy kvantummechanikai állapotban egy  $A$  fizikai mennyiséget akkor tudunk egzaktul mérni, ha a rendszer állapota sajátállapota az  $A$  mennyiséghez rendelt operátornak, vagyis a  $\Psi$  állapotra igaz, hogy:

$$\hat{A}\Psi = a\Psi. \quad (5.1)$$

Az  $A$  és  $B$  fizikai mennyiség olyan kvantummechanikai állapotokban mérhető egyszerre egzaktul, amely mindkét fizikai mennyiséghez rendelt operátornak sajátfüggvénye. Az előbbiekből és a mérési posztulátumból következik, hogy két fizikai mennyiség akkor lesz kompatibilis, ha a két fizikai mennyiséghez rendelt operátoroknak van legalább egy közös sajátfüggvényrendszere.

Ez a feltétel, noha fizikailag intuitív képet ad, nehezen kezelhető. Ezért bevezetünk egy ezzel ekvivalens feltételt a két operátor kommutátorát felhasználva.

## Két operátor kommutátora, példák, kapcsolat a klasszikus mechanika Poisson-zárójeleivel

Két operátor *kommutátora* egy újabb operátort eredményez. Az  $\hat{A}$  és  $\hat{B}$  operátorok kommutátorát úgy jelöljük, hogy  $[\hat{A}, \hat{B}]$ :

$[\hat{A}, \hat{B}]$ : operátor  $\rightarrow$  operátor ;

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}, \quad (5.2)$$

vagyis: 
$$[\hat{A}, \hat{B}]\Psi = \hat{A}(\hat{B}\Psi) - \hat{B}(\hat{A}\Psi). \quad (5.3)$$

Az eddig ismert operátorokkal néhány azonnali példa:

$$[\hat{x}, \hat{y}]\Psi = \hat{x}(\hat{y}\Psi) - \hat{y}(\hat{x}\Psi) = xy\Psi - yx\Psi = (xy - yx)\Psi = 0 \cdot \Psi = 0 \quad (5.4)$$

$$\begin{aligned} [\hat{p}_x, \hat{p}_y]\Psi &= \hat{p}_x(\hat{p}_y\Psi) - \hat{p}_y(\hat{p}_x\Psi) = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}\right)\Psi - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}\right)\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi = \\ &= -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} - (-\hbar^2) \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} = 0; \end{aligned} \quad (5.5)$$

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}_x]\Psi &= (x\hat{p}_x - \hat{p}_x x)\Psi = x\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)(x\Psi) = \\ &= x(-i\hbar) \frac{\partial \Psi}{\partial x} + (i\hbar)x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + i\hbar\Psi \Rightarrow [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar; \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_y]\Psi = (x\hat{p}_y - \hat{p}_y x)\Psi = x\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}\right)\Psi + \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}\right)(x\Psi) = 0\Psi = 0; \quad (5.7)$$

Az elméleti mechanikában használtuk a *Poisson-zárójelet*, amely a kommutátorok klasszikus analógiájának tekinthető.

Ha adott két fizikai mennyiségünk,  $f$  és  $g$ , amelyek az általánosított koordinátáktól és impulzusoktól függnének, akkor ezekre a Poisson-zárójel:

$$f = f(q_i, p_i); \quad g = g(q_i, p_i); \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (5.8)$$

$$\{f, g\} = \sum_i \left( \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \right). \quad (5.9)$$

Megjegyezzük, hogy a Hamilton-függvényt és a Poisson-zárójelet használva fel lehet írni a Hamilton-egyenleteket is:

$$\begin{cases} \dot{q}_j = \{q_j, H\} \\ \dot{p}_j = \{p_j, H\} \end{cases} \quad (5.10)$$

Ahhoz, hogy belássuk a Hamilton-egyenletek (5.10) alakját, először tekintsük a következő egyenlőséget:

$$\{f, H\} = \sum_i \left( \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = \sum_i \left( \frac{\partial f}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = \frac{df}{dt} \quad (5.11)$$

Azonnal felírható ugyanakkor, hogy

$$\{q_j, H\} = \sum_i \left( \frac{\partial q_j}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial q_j}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \quad (5.12)$$

ahol a summa alatt a második tag azért lesz nulla, mert az általánosított koordináta és a megfelelő általánosított impulzus függetlenek egymástól. Hasonlóan a következő (5.13) egyenletben az összeg alatt az első tag tűnik el:

$$\{p_j, H\} = \sum_i \left( \frac{\partial p_j}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial p_j}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = -\frac{\partial H}{\partial q_j}. \quad (5.13)$$

Az (5.11), (5.12) és (5.13) egyenletekből következik, hogy a Poisson-zárójellel felírt Hamilton-egyenletek azonosak a már ismert alakkal:

$$\begin{cases} \dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} \\ \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} \end{cases} \quad (5.14)$$

A Poisson-zárójelek néhány alapvető tulajdonsága:

$$1. \quad \{f, g\} = -\{g, f\} \text{ antikommutálás} \quad (5.15)$$

$$2. \quad \{f + g, h\} = \{f, h\} + \{g, h\}; \quad \{f, gh\} = \{f, g\}h + g\{f, h\}; \quad (5.16)$$

A klasszikus mechanikában használt általánosított impulzus és koordináta komponensekre igaz:

$$\{q_i, q_j\} = \sum_k \frac{\partial q_i}{\partial q_k} \frac{\partial q_j}{\partial p_k} - \frac{\partial q_i}{\partial p_k} \frac{\partial q_j}{\partial q_k} = 0, \quad (5.17)$$

$$\{p_i, p_j\} = \sum_k \frac{\partial p_i}{\partial q_k} \frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial p_i}{\partial p_k} \frac{\partial p_j}{\partial q_k} = 0, \quad (5.18)$$

$$\{q_i, p_j\} = \sum_k \frac{\partial q_i}{\partial q_k} \frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial q_i}{\partial p_k} \frac{\partial p_j}{\partial q_k} = \delta_{ij}. \quad (5.19)$$

A kvantummechanikában a kommutátor felel meg a klasszikus mechanika Poisson-zárójelének. Kvantummechanikában azonban a „{,}” szimbólum nem ugyanazt jelenti, amit a klasszikus mechanikában jelentett. Kvantummechanikában a „{,}” szimbólum az *antikommutátort* jelöli, amit a következőképpen értelmezünk:

$\{\hat{A}, \hat{B}\} : \text{operátor} \rightarrow \text{operátor} ;$

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (5.20)$$

vagyis:

$$\{\hat{A}, \hat{B}\}\Psi = \hat{A}(\hat{B}\Psi) - \hat{B}(\hat{A}\Psi). \quad (5.21)$$

Az antikommutátort egyelőre nem fogjuk használni, itt csak azért említettük meg, hogy világossá tegyük, hogy ez nem ekvivalens a Poisson-zárójellel.

## Kompatibilitás és kommutálás

**Tétel:** Két fizikai mennyiség ( $A$  és  $B$ ) kompatibilis, ha a hozzájuk rendelt operátorok kommutálnak. A tétel fordított irányban is igaz.

### Bizonyítás:

Bebizonyítjuk először a tételt direkt irányban: kompatibilis  $\rightarrow$  kommutálás.

Feltételezzük, hogy az  $A$  és  $B$  mennyiségekhez rendelt operátoroknak van egy közös sajátfüggvényrendszerük:

$$\hat{A}\varphi_n = a_n\varphi_n, \quad \hat{B}\varphi_n = b_n\varphi_n. \quad (5.22)$$

A bizonyítás során dolgozzunk diszkrét sajátfüggvényhalmazzal, ez nem befolyásolja a bizonyítás menetét, azonban egyszerűbb leírni a bizonyítást. Egy tetszőleges állapot hullámfüggvényét kifejezhetjük a közös sajátfüggvények segítségével:  $\Psi = \sum_n c_n \varphi_n$

Az  $A$  és  $B$  fizikai mennyiségekhez rendelt operátorok kommutátorának a hatása egy tetszőleges hullámfüggvényre:

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}]\Psi &= (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\sum_n c_n \varphi_n = \hat{A}\left(\hat{B}\sum_n c_n \varphi_n\right) - \hat{B}\left(\hat{A}\sum_n c_n \varphi_n\right) = \hat{A}\left(\sum_n b_n c_n \varphi_n\right) - \hat{B}\left(\sum_n a_n c_n \varphi_n\right) = \\ &= \sum_n a_n b_n c_n \varphi_n - \sum_n a_n b_n c_n \varphi_n = 0. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Ezáltal a tétel direkt irányban bizonyított. Bizonyítsuk most a tételt fordított irányban: kommutál  $\rightarrow$  kompatibilis.

Tételezzük fel tehát, hogy  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ . Legyenek:  $\hat{A}\varphi_n = a_n\varphi_n$  az  $\hat{A}$  sajátfüggvényei. Először tekintsük azt az esetet amikor az  $a_n$  értékek nem elfajultak.

$$\hat{B}(\hat{A}\varphi_n) = \hat{B}(a_n\varphi_n), \quad (5.24)$$

de mivel  $\hat{B}$  és  $\hat{A}$  kommutál  $\hat{A}(\hat{B}\varphi_n) = \hat{B}(\hat{A}\varphi_n)$

$$\hat{A}(\hat{B}\varphi_n) = a_n\hat{B}\varphi_n, \quad (5.25)$$

vagyis a  $\hat{B}\varphi_n$  úgy viselkedik, mint egy sajátfüggvény, ami szintén  $a_n$ -hez tartozik:  $\Rightarrow \hat{B}\varphi_n = c_n\varphi_n$  tehát  $\varphi_n$  sajátfüggvénye a  $\hat{B}$  nek is. Minden sajátértékre ezt a gondolatmenetet alkalmazva bebizonyítjuk, hogy van egy közös sajátfüggvényrendszer, és így az  $A$  és  $B$  mennyiség kompatibilis.

Ha az  $a_n$  elfajult sajátérték, akkor:  $\hat{A}\varphi_n^i = a_n\varphi_n^i; i = \overline{1, k}$  (5.26)

$$\hat{B}(\hat{A}\varphi_n^i) = a_n\hat{B}\varphi_n^i. \quad (5.27)$$

Felhasználva, hogy a két operátor kommutál:  $\hat{A}(\hat{B}\varphi_n^i) = a_n(\hat{B}\varphi_n^i) \rightarrow \hat{B}\varphi_n^i \in \Gamma$  ahol  $\Gamma$  egy alteret jelöl a Hilbert-térben. A  $\Gamma \subset L_2$  alteret a  $\varphi_n^i$  függvények generálják. Ez az altér *zárt* a  $\hat{B}$  operátorra nézve, vagyis csak azáltal, hogy a  $\hat{B}$ -vel hatunk, nem lehet kilépni az altérből, mert a fenti egyenlőség minden  $i = 1, 2, \dots, k$ -ra igaz. Általános esetben a  $\varphi_n^i$  függvények nem sajátfüggvényei a  $\hat{B}$  operátornak, de a  $\Gamma$  altéren ezeknek képezhető olyan lineáris kombinációja, amelyek sajátfüggvényei lesznek a  $\hat{B}$  operátornak:

$$u_j = \sum_i c_i \varphi_n^i \text{ úgy, hogy } \hat{B}u_j = b_j u_j. \quad (5.28)$$

(A  $\Gamma$  altéren is kell a  $\hat{B}$  operátornak sajátfüggvényei legyenek, mert a  $\hat{B}$  sajátfüggvényeinek a halmaza egy bázist alkot az egész  $L_2$  téren.) Ezekre az  $u_j$  sajátfüggvényekre igaz, hogy az  $\hat{A}$ -nak is sajátfüggvényei lesznek, mert:

$$\hat{A}u_j = \hat{A} \sum_i c_i \varphi_n^i = \sum_i c_i \hat{A}\varphi_n^i = \sum_i c_i a_n \varphi_n^i = a_n \sum_i c_i \varphi_n^i = a_n u_j. \quad (5.29)$$

Vagyis  $u_j$  a közös sajátfüggvényrendszer a  $\Gamma$  altéren. Az összes sajátérték esetén ezt megismételve bizonyítható, hogy van egy közös sajátfüggvényrendszer, és az  $A$  és  $B$  mennyiség így kompatibilis.

### 5.3 Teljes megfigyelhető mennyiségrendszer és a hullámfüggvény meghatározása

Több fizikai mennyiség akkor kompatibilis, ha páronként kompatibilisek.

**Definíció:** Az  $A_1, A_2, \dots, A_n$  mennyiségek egy teljes kompatibilis rendszert alkotnak, ha kompatibilisek, és csak egyetlenegy közös sajátfüggvényrendszerük van. Bármely  $n-1$  mennyiségnek ebből a rendszerből több mint egy közös sajátfüggvényrendszere lesz.

Ha azt szeretnénk, hogy a kvantummechanikai rendszerünk egy kevert állapotból egy jól meghatározott tiszta állapotba kerüljön, akkor szükségünk van egy másik  $B$  fizikai mennyiség mérésére is, amelyet meg tudunk mérni az  $A$  mennyiség mérése után. Ha az  $A$  és a  $B$  mennyiségek kompatibilisek, akkor a két mennyiség egymásutáni mérése után a kvantummechanikai rendszer már csak az  $\hat{A}$  és  $\hat{B}$  mért sajátértékeihez tartozó közös sajátfüggvények által generált  $\Gamma' \subset \Gamma$  altéren „mozoghat”. Ezt az alteret újabb kompatibilis mennyiségek mérésével csökkenthetjük egészen addig, amíg a hullámfüggvény jól meghatározottá válik. *Egy teljes megfigyelhető mennyiségrendszer egymásutáni mérésével a kvantummechanikai rendszer mindig tiszta állapotba hozható!*

### 5.4 Nem kommutáló, komplementáris fizikai mennyiségek. Határozatlansági relációk

Két fizikai mennyiség komplementáris, ha nem kompatibilis, azaz:  $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ .

Legyen az  $\hat{A}$  és  $\hat{B}$  kommutátora egy újabb  $\hat{C}$  operátor:  $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$ . (5.30)

A  $\Psi$  kvantummechanikai állapotban az  $A$  és  $B$  mennyiségek mérésének a diszperziója:

$$(\Delta A)_{\Psi}^2 = \left\langle \left( \hat{A} - \langle A \rangle \right)^2 \right\rangle_{\Psi} ; (\Delta A)_{\Psi}^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle_{\Psi} - \langle A \rangle_{\Psi}^2 . \quad (5.31)$$

$$(\Delta B)_{\Psi}^2 = \left\langle \left( \hat{B} - \langle B \rangle \right)^2 \right\rangle_{\Psi} ; (\Delta B)_{\Psi}^2 = \langle \hat{B}^2 \rangle_{\Psi} - \langle B \rangle_{\Psi}^2 . \quad (5.32)$$

$$\text{Bevezetünk most két új operátort: } \partial \hat{A} = \hat{A} - \langle A \rangle_{\Psi} ; \partial \hat{B} = \hat{B} - \langle B \rangle_{\Psi} . \quad (5.33)$$

Tudva, hogy  $\hat{A}$  és  $\hat{B}$  hermitikusak, azonnal következik, hogy  $\partial \hat{A}$  és  $\partial \hat{B}$  is az. Ezekre az új operátorokra igaz, hogy:

$$[\partial \hat{A}, \partial \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} . \quad (5.34)$$

Felhasználva, hogy az operátorok hermitikusak és normált hullámfüggvényeket használva ( $\langle \Psi, \Psi \rangle = 1$ ):

$$(\Delta A)_{\Psi}^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle_{\Psi} = \langle \Psi, \hat{A}^2 \Psi \rangle = \langle \hat{A} \Psi, \hat{A} \Psi \rangle, \quad (5.35)$$

$$(\Delta B)_{\Psi}^2 = \langle \hat{B} \Psi, \hat{B} \Psi \rangle. \quad (5.36)$$

A Schwartz-féle egyenlőtlenséget felírva a mi esetünkben:

$$\left| \langle \hat{A} \Psi, \hat{B} \Psi \rangle \right|^2 \leq \langle \hat{A} \Psi, \hat{A} \Psi \rangle \langle \hat{B} \Psi, \hat{B} \Psi \rangle. \quad (5.37)$$

A fenti egyenlőtlenségnek egy „gyengébb” alakja:

$$\left| \text{Im} \langle \hat{A} \Psi, \hat{B} \Psi \rangle \right|^2 \leq \left| \langle \hat{A} \Psi, \hat{B} \Psi \rangle \right|^2 \leq \langle \hat{A} \Psi, \hat{A} \Psi \rangle \langle \hat{B} \Psi, \hat{B} \Psi \rangle. \quad (5.38)$$

$$\begin{aligned} \text{Im} \langle \hat{A} \Psi, \hat{B} \Psi \rangle &= \frac{1}{2i} \left( \langle \hat{A} \Psi, \hat{B} \Psi \rangle - \langle \hat{B} \Psi, \hat{A} \Psi \rangle \right) = \frac{1}{2i} \left( \langle \Psi, \hat{A} \hat{B} \Psi \rangle - \langle \Psi, \hat{B} \hat{A} \Psi \rangle \right) = \\ &= \frac{1}{2i} \left( \langle \Psi, [\hat{A}, \hat{B}] \Psi \rangle \right) = \frac{1}{2} \left( \langle \Psi, \hat{C} \Psi \rangle \right) = \frac{1}{2} \langle C \rangle_{\Psi}. \end{aligned} \quad (5.39)$$

A Schwartz-féle egyenlőtlenség alapján felírhatjuk tehát, hogy:

$$\frac{1}{4} \left( \langle C \rangle_{\Psi} \right)^2 \leq (\Delta A)_{\Psi}^2 (\Delta B)_{\Psi}^2, \text{ vagyis:}$$

$$\frac{1}{2} \left| \langle C \rangle_{\Psi} \right| \leq (\Delta A)_{\Psi} (\Delta B)_{\Psi}. \quad (5.40)$$

A fenti egyenlőtlenség az általános határozatlansági összefüggés. Az (5.40) alapján: ha  $\langle C \rangle_{\Psi} \neq 0$  egy  $\Psi$  kvantummechanikai állapotban, és az  $A$  fizikai mennyiség pontosan meghatározott ( $\Delta A = 0$ ) akkor a komplementáris  $B$  mennyiségről nem lehet mondani semmit, mert  $\Delta B = \infty$ . Tehát két nem kompatibilis (komplementáris) fizikai mennyiséget nem lehet egyszerre tetszőleges pontossággal meghatározni egy olyan kvantummechanikai állapotban, ahol  $\langle C \rangle_{\Psi} \neq 0$ . Megjegyzendő, hogy két komplementáris fizikai mennyiség is mérhető egyszerre és egzaktul olyan kvantummechanikai állapotokban, ahol  $\langle C \rangle_{\Psi} = 0$ . Abban az esetben azonban, amikor  $\hat{C} = \text{Konst} = c \neq 0$  minden normált kvantummechanikai állapotban igaz, hogy

$$\langle C \rangle_{\Psi} = c \langle \Psi, \Psi \rangle = c \neq 0, \quad (5.41)$$

és ezáltal az  $A$  és  $B$  fizikai mennyiségek *sohasem* mérhetők egzaktul és egyszerre. Ilyen esetekre az (5.40) általános határozatlansági összefüggésnek

két közismert alakja van, amelyeket Heisenberg-féle határozatlansági összefüggéseknek nevezünk.

**1. példa:** Egy adott tengely irányú impulzus ( $p_x$ ) és a koordináta ( $x$ ) esete:

$$[x, p_x] = i\hbar \Rightarrow \hat{C} = \hbar \Rightarrow \Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (5.42)$$

Mivel  $p_x$  és  $x$  komplementáris mennyiségek, ha a részecske  $x$  koordinátája ismert, a  $p_x$  impulzusáról semmit nem tudunk. Ha például a koordinátatérbeli hullámfüggvény alakja egy Dirac-delta függvény, akkor az impulzustérbeli hullámfüggvény egy lokalizálatlan síkhullám

$$\Psi(x) \sim \delta(x - x_0) \Rightarrow \Phi(p_x) = c e^{\frac{i}{\hbar} p_x x_0}.$$

Erről azonnal meggyőződhetünk, ha felhasználjuk, hogy az impulzustérbeli hullámfüggvény a koordinátatérbeli hullámfüggvénynek a Fourier-transzformáltja. Az (5.42) összefüggés az impulzusra és koordinátákra vonatkozó jólismert Heisenberg-féle határozatlansági reláció:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (5.43)$$

Nilvánvaló, hogy hasonló összefüggés írható fel az  $y$  és  $z$  tengelyek mentén is.

**2. példa:** Az idő ( $t$ ) és az energia ( $E$ ): ezekre a mennyiségekre felírt Heisenberg-féle határozatlansági összefüggéseknek az értelmezése kissé komplikáltabb. Itt az aránylag széleskörben elfogadott Mandelstam–Tamm-féle értelmezést tárgyaljuk. Tekintsünk egy mérhető  $A$  fizikai mennyiséget, amelyre adott kvantummechanikai állapotban kiszámítható  $\Delta A_\Psi$  és  $\langle A \rangle_\Psi$ . Bevezethető ugyanakkor a következő időintervallum jellegű mennyiség

$$\tau_\Psi = \frac{\Delta A_\Psi}{\frac{d\langle A \rangle_\Psi}{dt}}, \quad (5.44)$$

amelynek szemléletes és azonnali jelentése az *időmérés bizonytalansága*, ha az időt az  $A$  mennyiség változásán keresztül mérjük. A  $\tau$  mennyiségre, illetve a rendszer  $E$  energiájára az adott  $\Psi$  kvantummechanikai állapotban szintén bizonyítható az (5.40) típusú határozatlansági összefüggés, és azt kapjuk, hogy:

$$\Delta E_\Psi \cdot \Delta \tau_\Psi \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (5.46)$$

A fenti Heisenberg-féle határozatlansági összefüggés értelmében, ha egy kvantummechanikai rendszernek megmérjük az energiáját, és ehhez a méréshez szükséges időt meghatározzuk valamely más mennyiség méréséből, a kapott energiaérték, illetve időintervallum határozatlansága összefügg egymással. Minél pontosabban határozzuk meg a rendszer energiáját, annál kevésbé tudjuk meghatározni a méréshez szükséges időintervallum hosszát.

## 5.5 Javasolt feladatok

1. Adott három lineáris operátor:  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ . Igazoljuk, hogy:

a.)  $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$ .

b.)  $e^{\hat{C}}\hat{A}e^{-\hat{C}} = \hat{A} + [\hat{C}, \hat{A}] + \frac{1}{2}[\hat{C}, [\hat{C}, \hat{A}]] + \dots$

c.)  $e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]}$  tudva, hogy  $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]]$ .

2. a.) Egy elektron  $10^{-10}$  m szélességű résen halad keresztül. Mekkora határozatlanságot jelent ez az impulzus rés irányában levő komponenseiben? Számítsuk ki ugyanezt egy proton esetében, és értelmezzük az eredményt.

b.) Egy elektron  $L = 0.1$  nm élhosszúságú dobozba van bezárva. Adjuk meg az impulzus-komponensek határozatlanságát.

3. Bizonyítsuk be, hogy a

$$\Psi(x, t) = \left( \frac{2\pi}{\sigma^2} \right) \exp\left( -\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2} \right) e^{i(\omega t + \theta)},$$

hullámfüggvény esetén a  $\Delta x \Delta p_x$  határozatlanság a lehető legkisebb ( $\hbar/2$ ).

4. Becsüljük meg az alapállapot energiáját a határozatlansági összefüggés alapján az alábbi két esetben:

a.) végtelen mély, derékszögű potenciálvölgyben mozgó kvantummechanikai részecske esetén;

b.) az egydimenziós harmonikus oszcillátor esetén.

## 6. FEJEZET

### Egydimenziós kvantummechanikai rendszerek általános tulajdonságai

Ebben a fejezetben a stacionárius Schrödinger-egyenletet fogjuk megoldani néhány alapvető egydimenziós rendszer esetében. Az egydimenziós feladatok általános tulajdonságainak a tárgyalása után a következő konkrét egydimenziós feladatokat fogjuk megoldani: kvantummechanikai részecske végtelen mély és véges mélységű potenciálvölgyben, lineáris harmonikus oszcillátor, potenciállépcső és potenciálgát. Számos érdekes, és a klasszikus mechanikában nem várt eredménnyel fogunk megismerkedni.

#### 6.1 Az egydimenziós stacionárius Schrödinger-egyenlet

A stacionárius Schrödinger-egyenletet fogjuk egydimenzióban tanulmányozni:

$$\hat{H}\Psi_i = E_i \Psi_i. \quad (6.1)$$

A stacionárius Schrödinger-egyenlet a Hamilton-operátor sajátérték-egyenlete. Keressük az  $E_i$  sajátértékeket és a  $\Psi_i$  sajátfüggvényeket. Emlékeztetőül, a stacionárius Schrödinger-egyenletet akkor kapjuk, ha egy időtől független potenciál ( $V$ ) esetén olyan megoldásokat keresünk, ahol a részecske térbeli megtalálhatósági valószínűsége időben nem változik. Nagyon sok időtől független potenciál esetében a potenciál felbontható a koordináták szerint, mint:

$$V(\vec{r}) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z) \quad (6.2)$$

Az  $x$  tengely irányú egydimenziós rendszerek annak a speciális esetnek felelnek majd meg, amikor  $V_2(y) = 1/\delta(y)$ ;  $V_3(z) = 1/\delta(z)$  ( $\delta(y)$  itt a Dirac-funkcionált jelöli). Ezen háromdimenziós potenciált úgy lehet elképzelni, mint egy  $x$  tengely irányába mutató végtelen mély és végtelen keskeny vezető sín. Amikor (6.2) igaz, a hullámfüggvényt a

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi_1(x) \cdot \Psi_2(y) \cdot \Psi_3(z) \quad (6.3)$$

alakban keressük, és a Schrödinger-egyenlet felbomlik három egydimenziós lineáris differenciálegyenletre. Azt, hogy a hullámfüggvényt a (6.3) szorzat alakban keressük, úgy tudjuk megindokolni, hogy ilyen alakban mindig kapunk fizikailag elfogadható megoldásokat. A számítások azonnaliak:

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) \Psi_1(x) \cdot \Psi_2(y) \cdot \Psi_3(z) + (V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)) \Psi_1(x) \cdot \Psi_2(y) \cdot \Psi_3(z) = \\
& = E \Psi_1(x) \cdot \Psi_2(y) \cdot \Psi_3(z)
\end{aligned}
\tag{6.4}$$

Elosztva mindkét oldalt a három egydimenziós hullámfüggvény szorzatával,

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{\Psi_1(x)} \frac{d^2 \Psi_1(x)}{dx^2} + \frac{1}{\Psi_2(y)} \frac{d^2 \Psi_2(y)}{dy^2} + \frac{1}{\Psi_3(z)} \frac{d^2 \Psi_3(z)}{dz^2} \right) + V_1(x) + V_2(y) + V_3(z) = E = E_1 + E_2 + E_3 \\
& \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Psi_1(x)} \frac{d^2 \Psi_1(x)}{dx^2} + V_1(x) \right) + \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Psi_2(y)} \frac{d^2 \Psi_2(y)}{dy^2} + V_2(y) \right) + \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Psi_3(z)} \frac{d^2 \Psi_3(z)}{dz^2} + V_3(z) \right) = \\
& = E_1 + E_2 + E_3
\end{aligned}
\tag{6.5}$$

három egydimenziós feladatot kapunk:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(\vec{r}) \Psi = E \Psi \Leftrightarrow \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi_1(x) + V_1(x) \Psi_1(x) = E_1 \Psi_1(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} \Psi_2(y) + V_2(y) \Psi_2(y) = E_2 \Psi_2(y) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \Psi_3(z) + V_3(z) \Psi_3(z) = E_3 \Psi_3(z) \end{cases}
\tag{6.6}$$

ahol  $E = E_1 + E_2 + E_3$ .

Ha egydimenziós, például az  $x$  tengely irányában értelmezett feladatunk van, akkor  $V_2(y) = 1/\delta(y)$ ;  $V_3(z) = 1/\delta(z)$ , és azonnal következik, hogy  $\Psi_2(y) = C\delta(y)$  és  $\Psi_3(z) = C\delta(z)$ . A nemtriviális  $x$  tengely irányú egydimenziós feladatunkra a stacionárius Schrödinger-egyenlet

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + V(x) \Psi(x) = E \Psi(x) \Leftrightarrow \\
& \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} ((E - V(x)) \Psi(x) = 0,
\end{aligned}
\tag{6.7}$$

ahol most már az  $E = E_I$  jelölést használjuk.

Ez a

$$\hat{H}_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)
\tag{6.8}$$

operátor sajátérték-egyenlete, és megegyezik a matematikából ismert Sturm–Liouville-típusú differenciálegyenletekkel. Az elfogadható hullámfüggvényeknek folytonosaknak kell lenniük. A folytonosság azért szükséges, hogy a valószínűségi áramsűrűség ne legyen sehol végtelen, és a kontinuitási egyenlet minden pontban teljesüljön. Olyan mozgások esetén, amikor a

kvantummechanikai rendszer kötött (végtelenbe nem mehet el), megköveteljük azt is, hogy a megoldásként kapott hullámfüggvényeink a végtelenben nullához tartanak, és így négyzetesen integrálhatók és 1-hez normálhatók legyenek. A hullámfüggvény általában deriválható is, ez a tulajdonság a valószínűségi áramsűrűség folytonosságához kapcsolódik. Olyan pontokban, ahol a valószínűségi áramsűrűség nem folytonos, a hullámfüggvény nem feltétlenül deriválható. Például végtelen mély potenciálgödörben levő kvantummechanikai részecskére a falak mellett a deriválhatóság nem teljesül.

Tételként kijelenthetjük: ha a potenciálnak nincs végtelen nagy szakadási pontja, akkor a (6.7) Sturm–Liouville-feladatra mindig kapható egy folytonos és deriválható megoldás. Ha a potenciálnak végtelen nagy szakadási pontja van, akkor a hullámfüggvény ezekben a pontokban nem biztos, hogy deriválható lesz.

## 6.2 Általános törvényszerűségek az egydimenziós Schrödinger-egyenlet megoldására

### 6.2.1 Konstans potenciál esete

Sok olyan gyakorlatilag fontos feladat van, ahol bizonyos intervallumon a potenciális energia konstans. Vizsgáljuk tehát először a feladat megoldását ilyen intervallumokon. Tekintsünk egy  $I$  intervallumot, ahol  $V(x)=V_0$ ,  $\forall x \in I$ . A stacionárius egydimenziós Schrödinger-egyenlet:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\Psi(x) = 0. \quad (6.9)$$

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$\begin{cases} \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) = k^2, \text{ ha } E > V_0 \\ \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) = -k^2, \text{ ha } E < V_0 \end{cases}. \quad (6.10)$$

1.) Legyen először  $E > V_0$ . Ilyenkor a bevezetett (6.10) jelölésekkel (6.9) a következő alakú lesz:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + k^2\Psi(x) = 0. \quad (6.11)$$

Mivel ez egy lineáris homogén differenciálegyenlet konstans együtthatókkal, a megoldást:  $\Psi(x) = ce^{rx}$  alakban keressük, és  $r$ -ben a következő egyenletet kapjuk:

$$r^2 + k^2 = 0 \Rightarrow r = \pm ik . \quad (6.12)$$

A hullámfüggvényünk ebben a tartományban tehát:

$$\Psi(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx} = A \cos(kx) + B \sin(kx) = D \sin(kx + \varphi) . \quad (6.13)$$

2.)  $E < V_0$ : Ez az eset klasszikusan nem létezik, ugyanis azt jelentené, hogy a részecske mozgási energiája negatív. A kvantummechanikában azonban ez is előfordulhat, ha az I intervallum nem terjed ki az egész térre. A megoldást ugyanolyan alakban keressük, mint az  $E > V_0$  esetében, és  $r$ -ben a következő egyenlethez jutunk:

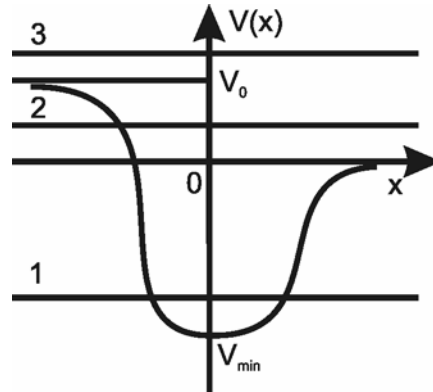
$$r^2 - k^2 = 0 \Rightarrow r = \pm k . \quad (6.14)$$

A hullámfüggvényünk ebben a tartományba a következő alakú:

$$\Psi(x) = c_1 e^{-kx} + c_2 e^{+kx} . \quad (6.15)$$

## 6.2.2 Általános potenciál egydimenziós feladatokra

A 6.1 ábra az egydimenziós feladatokra jellemző nagyon általános potenciált szemléltet:



6.1. ábra: Általános egydimenziós potenciál

Tételezzük fel tehát, hogy a potenciális energia mind a  $+\infty$ -ben, mint a  $-\infty$ -ben konstans értékhez tart. A potenciális energia zéró szintjét úgy válasszuk meg, hogy egyenlő legyen a kvantummechanikai részecskék potenciális energiájával a  $+\infty$ -ben. Legyen a részecske potenciális energiájának a minimuma  $V_{min} < 0$ . A feladatot az  $E$  összenergia három kvalitatíven különböző értékeire vizsgáljuk (lásd a 6.1 ábrát). Az 1. esetben a rendszer kötött állapotban van ( $E < 0$ ), a 2. esetben a részecske az egyik irányban szabad ( $0 < E < V_0$ ), a 3. esetben pedig a kvantummechanikai részecske mozgása mindkét irányban szabad ( $E > V_0$ ). A rendszer energiája nem lehet

kisebb, mint a  $V_{min}$ , mert ez azt jelentené, hogy a mozgási energia állandóan negatív, amely még a kvantummechanikában sem történhet meg.

1. eset:  $E < 0$

A hullámfüggvényt fel tudjuk írni a  $\pm \infty$  határesetekben, mert itt a potenciál konstans. Az 1. pontban kijelentettek alapján:

$$x \rightarrow \infty; V \rightarrow 0, E < 0 \Rightarrow \Psi(x) = c_1 e^{-qx} + c_2 e^{+qx}$$

Mivel a rendszer kötött, a hullámfüggvényre kapott megoldás a végtelenben nullához kell hogy tartson, ezért  $c_2 = 0$ , vagyis az  $x \rightarrow \infty$  esetben:

$$\Psi(x) \sim e^{-qx}; q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E. \quad (6.16)$$

Hasonlóan tanulmányozható az  $x \rightarrow -\infty$  eset is:

$$x \rightarrow -\infty, V \rightarrow V_0, E < 0 < V_0 \Rightarrow \Psi(x) = c_1 e^{-kx} + c_2 e^{+kx} \quad (6.17)$$

Mivel a rendszer a  $-\infty$  irányban is kötött, a megoldás itt is nullához kell hogy tartson, ezért  $c_2 = 0$ , és az  $x \rightarrow -\infty$  esetén a hullámfüggvény alakja:

$$\Psi(x) \sim e^{kx}; k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E). \quad (6.18)$$

*Megjegyzés:*  $V \approx V_{min}$  közelében a megoldás hasonlít a harmonikus oszcillátor megoldása során kapott hullámfüggvényhez, amit majd egy későbbi részben tárgyalunk. Ez a kijelentésünk könnyen belátható, ugyanis a minimumpont körül a  $V(x)$  potenciális energia sorbafejthető, és a sorfejtés első tagja a harmonikus oszcillátorra jellemző négyzetes tagot adja.

Az  $E < 0$  esetben a részecske kötött állapotban van, és ilyenkor a sajátértékek spektruma diszkrét. Az  $E < 0$  stacionáris állapotokban (a stacionárius állapotok a Hamilton-operátor sajátállapotai) az energia nem vehet fel tehát bármilyen lehetséges értéket, hanemcsak jól meghatározott értékekkel rendelkezhet. Ezen kijelentéseink abból következnek, hogy a hullámfüggvényünk a  $\pm \infty$ -ben nullához kell hogy tartson. Ez a feltétel csak bizonyos hullámfüggvények létét engedi majd meg, és ezáltal kvantálja a lehetséges energia-sajátértékeket. Konkrét feladatokon keresztül ezt később sokkal világosabban belátjuk. Az egydimenziós rendszerekben a diszkrét sajátértékspektrumokra egy fontos tételt jelenthetünk ki:

Tétel: Egydimenziós rendszerek esetén a kötött állapotokban a sajátértékek spektruma diszkrét, és a sajátértékek nem elfajultak. (Ilyen eset például a végtelen mély potenciálgödör vagy a harmonikus oszcillátor.)

### Bizonyítás:

A tételnek azt a részét, amely a sajátértékek diszkrét spektrumára utal, nem bizonyítjuk, azonban részben már megindokoltuk az előbbieken. Bizonyítsuk most azt, hogy a sajátértékek nem elfajultak. A bizonyítást „reductio ad absurdum”-mal végezzük: tételezzük fel, hogy van két egymástól független megoldás, amely ugyanahhoz az  $E$  energia-sajátértékhez tartozik (vagyis a sajátérték elfajult). Ekkor:

$$\frac{d^2\Psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\Psi_1(x) = 0 \mid \cdot \frac{1}{\Psi_1} \quad (6.19)$$

$$\frac{d^2\Psi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\Psi_2(x) = 0 \mid \cdot \frac{1}{\Psi_2} \quad (6.20)$$

A  $\Psi_1$ -el, illetve  $\Psi_2$  -vel elosztott két egyenletet egymásból kivonva

$$\frac{1}{\Psi_1} \frac{d^2\Psi_1(x)}{dx^2} - \frac{1}{\Psi_2} \frac{d^2\Psi_2(x)}{dx^2} = 0, \quad (6.21)$$

majd  $\Psi_1\Psi_2$  -vel beszorozva:

$$\Psi_2 \frac{d^2\Psi_1(x)}{dx^2} - \Psi_1 \frac{d^2\Psi_2(x)}{dx^2} = 0. \quad (6.22)$$

A fenti egyenlet felírható mint

$$\frac{d}{dx} \left( \Psi_2 \frac{d\Psi_1(x)}{dx} - \Psi_1 \frac{d\Psi_2(x)}{dx} \right) = 0, \quad (6.23)$$

és innen azt kapjuk, hogy:  $\Psi_2 \frac{d\Psi_1(x)}{dx} - \Psi_1 \frac{d\Psi_2(x)}{dx} = konst.$  (6.24)

Az  $x \rightarrow \pm\infty$  esetekből azonnal következik, hogy  $konst = 0$ , mivel a sajátfüggvény ezen határokon 0, és a deriváltak végesek. Tehát

$$\Psi_2 \frac{d\Psi_1(x)}{dx} - \Psi_1 \frac{d\Psi_2(x)}{dx} = 0, \quad (6.25)$$

$$\frac{d\Psi_1(x)}{\Psi_1} = \frac{d\Psi_2(x)}{\Psi_2} \Rightarrow \ln \Psi_1 = \ln \Psi_2 + c \Rightarrow \Psi_1 = c\Psi_2, \quad (6.26)$$

ami által ellentmondásra jutottunk, ugyanis a feltételezett két megoldás nem független egymástól!

A diszkrét sajátértékspektrumhoz tartozó sajátfüggvényekre az egydimenziós rendszerekre igaz az *oszcillációk tétele*. Ezt a tételt itt röviden, bizonyítás nélkül kijelentjük, majd konkrét feladatok kapcsán ennek igaz voltáról meggyőződhetünk. A tétel értelmében, ha a diszkrét sajátértékeket növekvő sorrendbe indexeljük, az  $n$ -edik ( $E_n$ ) ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ) sajátértékhez tartozó  $\Psi_n$  hullámfüggvénynek  $n$  darab zérushelye (csomópontja) van. Ha  $m > n$ , akkor a  $\Psi_m$ -nek van legalább egy zérushelye a  $\Psi_n$  két egymást követő zérushelyei között.

## 2. eset: $0 < E < V_0$

Ebben az esetben a kvantummechanikai részecske mozgása az egyik irányban ( $+\infty$ ) szabad (végtelen).

$$x \rightarrow \infty, E > 0 \Rightarrow \Psi(x) = D \sin(kx + \varphi), k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad (6.27)$$

A kvantummechanikai rendszer az  $x \rightarrow -\infty$  irányban kötött, a hullámfüggvény viselkedése az  $x \rightarrow -\infty$  határesetben:

$$x \rightarrow -\infty, V = V_0, E < V_0 \Rightarrow \Psi(x) \sim e^{+qx}, q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \quad (6.28)$$

A sajátértékek spektruma ebben az esetben folytonos, a sajátfüggvények négyzetesen nem integrálhatók, és a sajátértékek nem elfajultak (az előző bizonyítás ugyanúgy működik, azzal a különbséggel, hogy most a  $konst = 0$ -t csak az  $x \rightarrow -\infty$  ben tudjuk bizonyítani, de ez elegendő is).

## 3. eset: $E > V_0$

Ilyenkor a részecske mindkét irányban szabadon tud mozogni.

$$x \rightarrow \infty, V = 0, E > V \Rightarrow \Psi(x) = D \sin(l_1 x + \varphi), l_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad (6.29)$$

$$x \rightarrow -\infty, V = V_0,$$

$$E < V_0 \Rightarrow \Psi(x) = D' \sin(l_2 x + \varphi), l_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \quad (6.30)$$

A megoldásképpen kapott  $\Psi$  hullámfüggvények négyzetesen nem integrálhatók. A sajátértékek spektruma folytonos, a sajátfüggvényeket a (6.13) kifejezés adja, és a sajátértékek kétszeresen elfajultak. Az, hogy a sajátértékek kétszeresen elfajultak, azonnal következik a sajátfüggvények (6.13) alakjából, ahol két egymástól független függvény összege szerepel.

## 6.3 A sajátfüggvények paritása

Amikor a  $V(x)$  potenciális energiafüggvény páros, érdekes tétel bizonyítható a sajátfüggvények paritására vonatkozóan:

Tétel: Ha  $V(x)$  páros függvény, és ha a sajátérték nem elfajult, a sajátfüggvények vagy páros vagy páratlan függvények. Az alapállapothoz tartozó sajátfüggvény mindig páros (nincs csomópontja). Ha a sajátérték kétszeresen elfajult, akkor mindig képezhető két olyan lineárisan független sajátfüggvény, amelynek jól meghatározott paritása van (páros vagy páratlan

függvény), és a sajátfüggvények általános alakja felírható ezek lineáris kombinációjaként.

Bizonyítás:

1). Ha a sajátérték nem elfajult

Az egydimenziós Schrödinger-egyenlet:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\Psi(x) = 0. \quad (6.31)$$

Felhasználva a potenciális energia paritását, az  $x \rightarrow -x$  változócserevel:

$$V(-x) = V(x) \Rightarrow \frac{d^2\Psi(-x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\Psi(-x) = 0. \quad (6.32)$$

Ezek alapján  $\Psi(-x)$  szintén megoldás.

$$\text{Mivel a sajátértékek nem elfajultak} \Rightarrow \Psi(-x) = c\Psi(x), \quad (6.33)$$

ugyanis  $\Psi(x)$  és  $\Psi(-x)$  ugyanahhoz az energiához tartozó megoldások.

Felhasználva tehát a (6.33) összefüggést:

$$\Psi(-x) = c\Psi(x) = c^2\Psi(-x) \Rightarrow c^2 = 1 \Rightarrow c = \pm 1, \quad (6.34)$$

$$\text{ha } c = 1 \rightarrow \Psi(x) = \Psi(-x) \quad \text{a függvény páros,} \quad (6.35)$$

$$\text{ha } c = -1 \rightarrow \Psi(x) = -\Psi(-x) \quad \text{a függvény páratlan.} \quad (6.36)$$

A sajátfüggvények tehát vagy párosak vagy páratlanok. Mivel az alapállapothoz tartozó sajátfüggvénynek nincsenek csomópontjai (az oszcilláció tétele alapján), ez a sajátfüggvény páros kell legyen.

2). Ha a sajátérték kétszeresen elfajult

Ebben az esetben egy  $E$  értékhez két egymástól független  $\Psi_1(x)$  és  $\Psi_2(x)$  függvény tartozik. Az előző esethez hasonlóan  $\Psi_1(-x)$  és  $\Psi_2(-x)$  szintén egymástól független megoldások, és a következő esetek lehetségesek:

a. Ha a  $\Psi_1(x)$  és  $\Psi_2(x)$ -nek is jól meghatározott paritása van, akkor a keresett függvényeink maguk a  $\Psi_1(x)$  és  $\Psi_2(x)$  függvények. (6.37)

b. Ha legalább az egyik  $\Psi_1(x)$  vagy  $\Psi_2(x)$  függvénynek nincs jól meghatározott paritása, ebből az következik, hogy a másiknak sem lehet, ugyanis ilyenkor  $\Psi_1(-x) = C\Psi_2(x)$  és  $\Psi_2(-x) = \Psi_1(x)/C$ . Ilyen esetben képezhetők a nem nulla

$$\begin{cases} \Phi_1(x) = \Psi_1(x) + \Psi_1(-x) \\ \Phi_2(x) = \Psi_2(x) - \Psi_2(-x) \end{cases} \quad (6.38)-(6.39)$$

függvények, amelyekre igaz, hogy szintén sajátértékei az egydimenziós Schrödinger-egyenletünknek, és amelyekre igaz, hogy:

$$\Phi_1(x) = \Phi_1(-x) \quad (6.40)$$

$$\Phi_2(x) = -\Phi_2(-x) \quad (6.41)$$

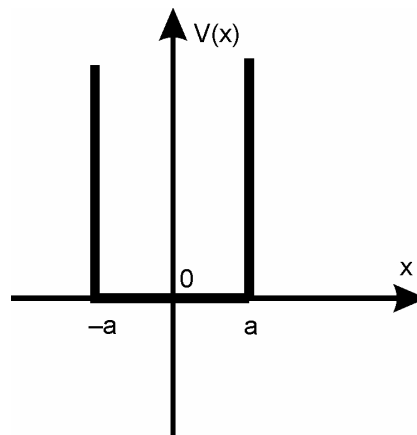
vagyis  $\Phi_1(x)$  páros sajátfüggvény, és  $\Phi_2(x)$  páratlan sajátfüggvény. Mivel ezeknek különböző paritása van, egymástól lineárisan függetlenek, és minden sajátfüggvény kifejezhető ezeknek a lineáris kombinációjaként.

## 6.4. Példák egydimenziós kötött kvantummechanikai rendszerekre

### 6.4.1 Végtelen mély potenciálgödör

A stacionárius Schrödinger-egyenletet akarjuk megoldani egy végtelen mély potenciálgödörben. A végtelen mély potenciálgödört az egyszerűség kedvéért az  $x = 0$  pontra szimmetrikusnak tekintjük, és matematikailag a következő alakban értelmezzük:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \in (-a, a) \\ \infty, & x \in (-\infty, -a] \cup [a, \infty) \end{cases} \quad (6.42)$$



**6.2. ábra:** Végtelen mély potenciálgödör az  $x$  tengely irányába mozgó kvantummechanikai részecskére

A stacionárius Schrödinger-egyenletet

$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi = E\Psi \quad (6.43)$$

három tartományban kell megoldanunk: 
$$\begin{cases} x \leq -a \\ x \in (-a, a) \\ x \geq a \end{cases}$$

Azon tartományokban, ahol a potenciál végtelen, a megoldás azonnali:

$$\left. \begin{array}{l} x \leq -a \\ x \geq a \end{array} \right\} \Psi = 0$$

A közbeeső tartományban az egyenletünk a következőképpen néz ki:

$$E\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} \Rightarrow \Psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi = 0. (E > 0) \quad (6.44)$$

A megoldást a  $\Psi = \exp(bx)$  alakban keressük, ahonnan adódik:

$$r^2 + b = 0 \rightarrow r = \pm i\sqrt{b}, \quad b = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow \Psi(x) = c_1 e^{i\sqrt{b}x} + c_2 e^{-i\sqrt{b}x}, x \in (-a, a) \quad (6.45)$$

Amint azt az egydimenziós rendszerek általános tulajdonságainál tárgyaltuk, az össz-hullámfüggvénytől megköveteljük, hogy folytonos legyen az egész  $(-\infty, +\infty)$  intervallumon. A folytonosság azonban csak a  $-a$  és  $a$  pontokban lehet probléma, ahol ez a kikötés a következő feltételekhez vezet:

$$\begin{cases} \Psi(-a) = c_1 e^{-i\sqrt{b}a} + c_2 e^{i\sqrt{b}a} = 0 \\ \Psi(a) = c_1 e^{i\sqrt{b}a} + c_2 e^{-i\sqrt{b}a} = 0 \end{cases} \quad (6.46)$$

Más megközelítésben, a hullámfüggvényünk átírható harmonikus függvényeket tartalmazó tagokkal

$$\Psi(x) = c_1 e^{i\sqrt{b}x} + c_2 e^{-i\sqrt{b}x} \rightarrow \Psi(x) = A \sin(\sqrt{b}x) + B \cos(\sqrt{b}x), \quad (6.47)$$

és ebben az esetben a folytonossági feltételeink:

$$\begin{cases} \Psi(-a) = -A \sin(\sqrt{b}a) + B \cos(\sqrt{b}a) = 0 \\ \Psi(a) = A \sin(\sqrt{b}a) + B \cos(\sqrt{b}a) = 0 \end{cases} \quad (6.48)$$

Megoldásaink az összes olyan nem konstansul nulla harmonikus függvények, amelyekre a fenti feltétel teljesül. A két egyenletet összeadva, illetve kivonva, egy egyszerűbb feltételpárhoz jutunk:

$$\begin{cases} \Psi(-a) + \Psi(a) = 2B \cos(\sqrt{b}a) = 0 \\ \Psi(-a) - \Psi(a) = -2A \sin(\sqrt{b}a) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} B \cos(\sqrt{b}a) = 0 \\ A \sin(\sqrt{b}a) = 0 \end{cases} \quad (6.49)$$

A következő két típusú megoldás lesz tehát elfogadható:

$$1.) \mathbf{A} = \mathbf{0} \text{ és } \mathbf{B} \neq \mathbf{0}, \cos(\sqrt{b}a) = 0 \Rightarrow \Psi(x) = B \cos(\sqrt{b}a) \quad (6.50)$$

$$\cos(\sqrt{b}a) = 0 \Rightarrow \sqrt{b}a = (2k+1)\frac{\pi}{2}, k = 0, 1, 2, \dots \quad (6.51)$$

A fenti (6.51) egyenlet a kvantummechanikai rendszer lehetséges energiáira a következő feltételt adja:

$$E = \left(\frac{2k+1}{2}\right)^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{(2k+1)^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}, k = 0, 1, 2, \dots \quad (6.52)$$

$$2.) \mathbf{B} = 0 \text{ és } \mathbf{A} \neq 0, \sin(\sqrt{b}a) = 0 \Rightarrow \Psi(x) = A \sin(\sqrt{b}x) \quad (6.53)$$

$$\sin(\sqrt{b}a) = 0 \Rightarrow \sqrt{b}a = 2k \frac{\pi}{2}, k = 1, 2, \dots \quad (6.54)$$

A  $k = 0$  esetben a  $b = 0$  ( $E = 0$ ), ekkor azonban  $\Psi = 0$  az egész tartományban és ez a hullámfüggvény számunkra nem elfogadható, tehát ezt a megoldást kizárjuk. A (6.54) egyenlet a kvantummechanikai rendszer lehetséges energiáira a

$$E = \frac{k^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{(2k)^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}, k = 1, 2, \dots \quad (6.55)$$

feltételt adja. Az energiára kapott diszkrét spektrum két esetét ((6.52) és (6.55)) összefoglalhatjuk egy feltételként is:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}, n = 1, 2, \dots \quad (6.56)$$

Az  $n$  kvantumszámhoz tartozó hullámfüggvények (sajátfüggvények) alakja:

$$\Psi_n(x) = \begin{cases} A \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right), & n \text{ páros} \\ B \cos\left(\frac{n\pi}{2a}x\right), & n \text{ páratlan} \end{cases} \quad (6.57)$$

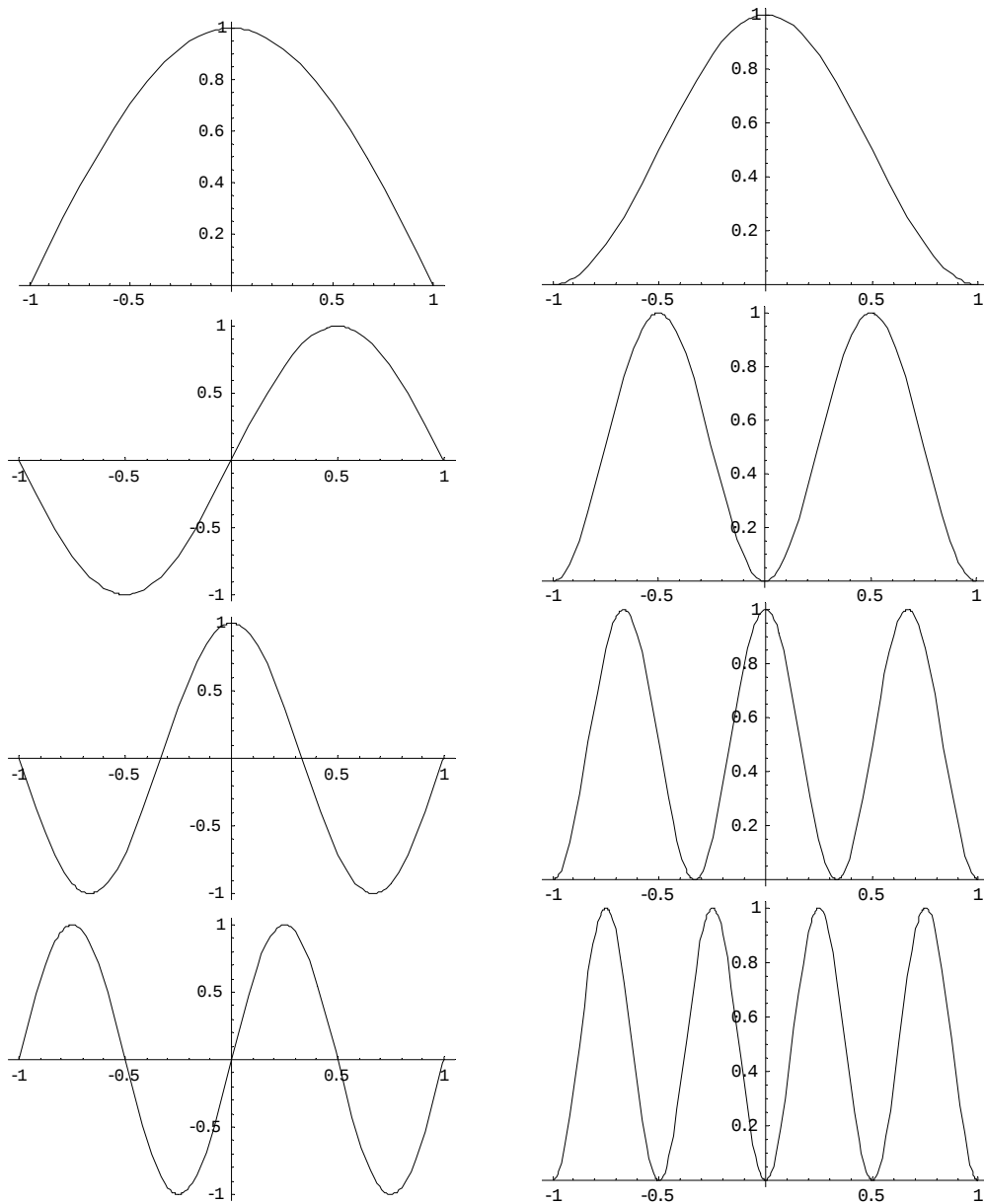
Az  $n = 1, 2, 3, 4$  esetben a hullámfüggvény ( $\Psi$ ) és a megtalálhatósági valószínűség-sűrűség ( $\Psi^2$ ) a 6.3 ábrán láthatók:

A megoldott feladattal kapcsolatban most néhány lényeges megjegyzést teszünk:

1. A kapott energia-sajátértékek nem elfajultak, egy energiaértékhez csak egyetlen kvantummechanikai állapot tartozik. A lehetséges energiaértékek spektruma diszkrét.
2. Amint azt az általános tárgyaláskor láttuk, mivel a potenciál szimmetrikus a (6.57) hullámfüggvények mind vagy párosak, vagy páratlanok. Az alapállapothoz tartozó hullámfüggvény páros.
3. A kapott (6.57) hullámfüggvények egy bázist alkotnak a  $[-a, a]$  intervallumon értelmezett  $f(x)$  egyváltozós valós függvények terén, amelyekre  $f[a] = f[-a] = 0$ . Egy tetszőleges ilyen típusú függvény kifejezhető a (6.57) sajátfüggvények szerint, és ezt a kifejtést nevezzük Fourier-sorfejtésnek:

$$f(x) = \sum_n C_n \Psi_n(x) = \sum_n A_n \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) + B_n \cos\left(\frac{n\pi}{2a}x\right). \quad (6.58)$$

4. Az  $n = 1, 2, 3, \dots$  kvantumszámokhoz tartozó sajátfüggvénynek  $n - 1$  zérushelye van a  $(-a, a)$  intervallumon.



**6.3. ábra:** Az első négy hullámfüggvény és modulusnégyzetük a végtelen mély potenciálgödör esetén (a bal oldali ábrákon  $\Psi$ , a jobb oldaliakon a  $|\Psi|^2$ ).  
Látható, hogy alapállapotban a részecske legnagyobb valószínűséggel a potenciálvölgy közepén található

## 6.4.2 Lineáris harmonikus oszcillátor

A lineáris harmonikus oszcillátor Hamilton-függvénye

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2, \quad (6.59)$$

ahol  $\omega$  az oszcillátor körfrekvenciáját jelöli,  $m$  pedig a harmonikus mozgást végző részecske tömege. A mozgás tehát az  $U = \frac{kx^2}{2}$  potenciális térben történik. Ilyen térben való mozgás nagyon általános, és kitüntetett jelentőséggel bír, ugyanis nagyon sok minimumponttal rendelkező potenciál a minimumpont körül ( $dU/dx = 0$  pont körül) ezzel a potenciállal közelíthető meg:

$$U(x) = U(a) + \left. \frac{dU(x)}{dx} \right|_{x=a} (x-a) + \left. \frac{d^2U(x)}{dx^2} \right|_{x=a} \frac{(x-a)^2}{2} + \dots \quad (6.60)$$

$$U(x) = U(a) + \frac{k}{2}(x-a)^2 + \dots, \quad x' = x-a \Rightarrow U(x') = U(0) + \frac{k}{2}x'^2 + \dots \quad (6.61)$$

Ha a potenciális energia nullpontját úgy választjuk meg, hogy  $U(0) = 0$ , és  $k \neq 0$  akkor  $x=a$  környezetében:

$$U(x') = \frac{kx'^2}{2}. \quad (6.62)$$

Minden részecskének a kis amplitudójú rezgése a potenciális energia minimumpontja körül klasszikusan egy harmonikus rezgőmozgással közelíthető meg, ha  $k \neq 0$ . Lássuk most, mit mondhatunk a kvantummechanika keretében erről a nagyon általános esetről.

A stacionárius Schrödinger-egyenlet a fenti harmonikus potenciál esetében:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\Psi = E\Psi \Leftrightarrow \left( \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \left( \frac{m\omega^2 x^2}{2} - E \right) \right) \Psi(x) = 0 \quad (6.63)$$

Ha a harmonikus potenciált az egész  $(-\infty, \infty)$  intervallumra kiterjesztjük, a rendszer minden  $E$  energiaértékre kötött lesz, és így  $\Psi(x)$ -re négyzetesen integrálható megoldásokat keresünk ( $\Psi(x) \rightarrow 0$ , hogyha  $x \rightarrow \pm\infty$ , ugyanis határértékekben  $V \rightarrow \infty$ ). Az egyszerűbb számítások végett a (6.63) egyenletet átírjuk a  $\xi$  adimenzionális (mértékegység nélküli) változóra:

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x; \rightarrow d\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}dx. \quad (6.64)$$

A következő egyenletek adódnak:

$$\frac{d^2\Psi(\xi)}{d\xi^2} \frac{m\omega}{\hbar} - \frac{2m}{\hbar^2} \left( \frac{m\omega^2}{2} \xi^2 \frac{\hbar}{m\omega} - E \right) \Psi(\xi) = 0; \quad (6.65)$$

$$\frac{d^2\Psi(\xi)}{d\xi^2} \frac{m\omega}{\hbar} - \frac{m\omega}{\hbar} \xi^2 \Psi(\xi) + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi(\xi) = 0; \quad (6.66)$$

$$\frac{d^2\Psi(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2 \Psi(\xi) + \frac{2}{\hbar\omega} E \Psi(\xi) = 0; \quad (6.67)$$

$$\frac{d^2\Psi(\xi)}{d\xi^2} + (2\varepsilon - \xi^2) \Psi(\xi) = 0, \quad (6.68)$$

ahol 
$$\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}. \quad (6.69)$$

A fenti (6.68) differenciálegyenletnek a négyzetesen integrálható megoldásait keressük, vagyis ha  $\xi \rightarrow \pm\infty \Rightarrow \Psi(\xi) \rightarrow 0$ . A  $\xi \rightarrow \pm\infty$  határértékben a (6.68) egyenletünk

$$\frac{d^2\Psi_{\pm\infty}(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2 \Psi_{\pm\infty}(\xi) = 0, \quad (6.70)$$

és könnyen belátható, hogy ennek az elfogadható megoldása a tekintett határértékben

$$\Psi_{\pm\infty}(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad (6.71)$$

alakú, ugyanis  $\Psi'_{\pm\infty}(\xi) = -\xi \exp(-\xi^2/2)$  és:

$$\Psi''_{\pm\infty}(\xi) = (\xi^2 - 1) \exp(-\xi^2/2) \approx \xi^2 \exp(-\xi^2/2).$$

Az egész  $(-\infty, \infty)$  intervallumon a megoldást tehát a

$$\Psi(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} V(\xi), \quad (6.72)$$

alakban keressük, ahol  $V(\xi)$  egy tetszőleges, de véges fokú polinom lehet. A  $\pm\infty$ -ben ennek a függvénynek a viselkedése megfelelő lesz, ugyanis az exponenciális tag biztosítani fogja azt, hogy a végtelenben a megfelelőképpen *nullához* tartson a hullámfüggvény.  $V(\xi)$ -re felírt egyenletünk a Hermite-polinomok egyenlete:

$$\frac{d^2V(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dV(\xi)}{d\xi} + (2\varepsilon - 1)V(\xi) = 0. \quad (6.73)$$

Keressük tehát  $V(\xi)$ -re a megoldást a következő általános véges  $n$ -ed fokú polinom alakban

$$V(\xi) = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + a_3\xi^3 + \dots + a_k\xi^k + \dots + a_n\xi^n, \quad (6.74)$$

ahol tételezzük fel, hogy  $a_n \neq 0$ . Ilyen esetben:

$$V(\xi) = \sum_{i=0}^n a_i \xi^i; \quad \frac{dV(\xi)}{d\xi} = \sum_{i=1}^n i a_i \xi^{i-1}; \quad \frac{d^2V(\xi)}{d\xi^2} = \sum_{i=2}^n i(i-1) a_i \xi^{i-2}; \quad (6.75)$$

Behelyettesítve ezeket a (6.68) egyenletbe:

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^n i(i-1) a_i \xi^{i-2} - 2\xi \sum_{i=0}^n i a_i \xi^{i-1} + (2\varepsilon - 1) \sum_{i=0}^n a_i \xi^i = \\ = \sum_{i=0}^{n-2} [(i+1)(i+2) a_{i+2} - 2i a_i + (2\varepsilon - 1) a_i] \xi^i + (2\varepsilon - 1 - 2n) a_n \xi^n + (2\varepsilon - 1 - 2n - 2) a_{n-1} \xi^{n-1} = 0 \end{aligned} \quad (6.76)$$

Ahhoz, hogy a (6.68) differenciálegyenletre egy ilyen megoldást kapjunk,  $\xi$  minden hatványának az együtthatója külön-külön nulla kell hogy legyen:

$$(i+1)(i+2) a_{i+2} - 2i a_i + (2\varepsilon - 1) a_i = 0 \Rightarrow a_{i+2} = a_i \frac{2i - 2\varepsilon + 1}{(i+1)(i+2)} \quad (6.77)$$

Mivel  $a_i = 0$  minden  $i > n$  esetre, szükséges, hogy  $a_{n+1} = 0$  és  $a_{n+2} = 0$ , amiből (6.77) szerint az következik, hogy:

$$\begin{aligned} a_n (2\varepsilon - 1 - 2n) &= 0; \\ a_{n-1} [2\varepsilon - 1 - 2(n-1)] &= 0. \end{aligned} \quad (6.78) - (6.79)$$

Szintén (6.77)-ből következik, hogy a sorozatot az első két elem megadásával tudjuk generálni:  $a_0$  és  $a_1$  meghatározza tehát a sorozatot. A (6.78) és (6.79) összefüggések alapján azonban, mivel  $a_n \neq 0$ , következik:

$$\varepsilon = n + \frac{1}{2} \quad (6.80)$$

és feltétlenül az kell, hogy:  $a_{n-1} = 0$ ! A (6.77) szerint így  $a_{n-3} = a_{n-5} = \dots = 0$ . Két esetet fogunk tehát megkülönböztetni: 1)  $n$  páros:  $a_0 \neq 0$  és  $a_1 = 0$ , ilyenkor  $a_{2k} \neq 0$  és  $a_{2k+1} = 0$ ;

2)  $n$  páratlan:  $a_0 = 0$  és  $a_1 \neq 0$ , ilyenkor  $a_{2k} = 0$  és  $a_{2k+1} \neq 0$ . Abból a feltételből tehát, hogy  $V(\xi)$  véges fokú polinom, következik, hogy  $\varepsilon$  nem vehet fel akármilyen értéket, a lehetséges értékei az  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$  pozitív egész kvantumszám (a polinom foka) által kvantáltak (6.80). A lehetséges hullámfüggvények

$$\Psi(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} V(\xi) \quad (6.81)$$

alakúak, ahol a  $V(\xi) = c H_n(\xi)$  megoldásaink a Hermite-polinomokat értelmezik ( $c$  egy megfelelően megválasztott normálási konstans). Az  $n$ -ed fokú Hermite-polinomok megszerkeszthetők felhasználva a  $V(\xi)$  együtthatói között kapott (6.77) rekurziós összefüggéseket, kiindulva vagy tetszőleges  $a_0 \neq 0$  és  $a_1 = 0$  ( $n$  páros), vagy  $a_0 = 0$  és  $a_1 \neq 0$  ( $n$  páratlan) értékből. Az  $n$  kvantumszámhoz tartozó sajátfüggvényünk tehát

$$\Psi_n(\xi) = C_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) \quad (6.82)$$

ami felírható az eredeti  $x$  változónk segítségével is:

$$\Psi_n(x) = C_n e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right). \quad (6.83)$$

Az energia lehetséges értékei (a Hamilton-operátor sajátértékei) következnek a (6.69) és (6.80) alapján:

$$E = \varepsilon\hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.84)$$

Megjegyezzük, hogy ez a kvantálási feltétel eltér attól, amit a Bohr–Sommerfeld-féle kvantálásból kapnánk: az energiaszintek között a különbségek ugyanakkorák, de ebben az esetben létezik egy nullponti energia ( $n = 0$  esetén  $E \neq 0$ ).

A Hermite-polinomokat matematikai táblázatokból is megkaphatjuk. A  $C_n$  normálási együttható is megkapható az  $n$ -ed fokú Hermite-polinomok ismeretében. Az  $n = 0, 1, 2, 3, 4$  és  $5$  értékhez tartozó Hermite-polinomok:

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1 \\ H_1(\xi) &= 2\xi \\ H_2(\xi) &= -2 + 4\xi^2 \\ H_3(\xi) &= -12\xi + 8\xi^3 \\ H_4(\xi) &= 12 - 48\xi^2 + 16\xi^4 \\ H_5(\xi) &= 120\xi - 160\xi^3 + 32\xi^5 \end{aligned} \quad (6.85)$$

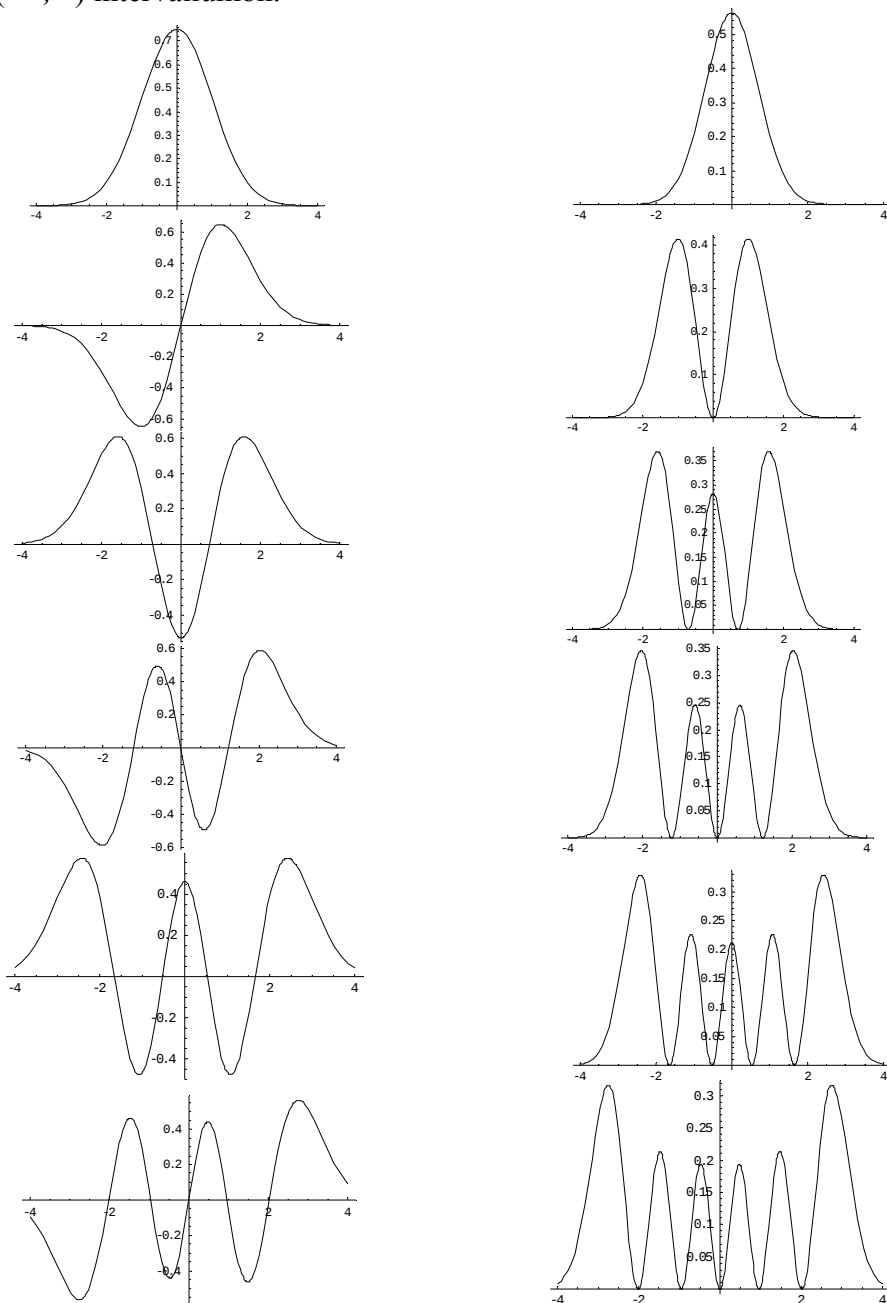
Az  $n$ -ed fokú Hermite-polinom általános alakja alapján felírható a normált hullámfüggvények általános alakja:

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{(2^n n!)}} \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right). \quad (6.86)$$

Akárcsak a végtelen mély potenciálgödör esetén, itt is a következő megjegyzéseket tehetjük:

1. A kapott energia-sajátértékek nem elfajultak, egy energiértékhez csak egyetlen egy kvantummechanikai állapot tartozik. A lehetséges energiaértékek spektruma diszkrét.
2. Amint azt az általános tárgyalás keretében szimmetrikus potenciálokra előrejeleztük, a (6.86) hullámfüggvények mind vagy párosak vagy páratlanok. Az alapállapothoz tartozó hullámfüggvény páros.
3. A kapott (6.86) hullámfüggvények egy bázist alkotnak a  $(-\infty, \infty)$  intervallumon értelmezett  $f(x)$  egyváltozós valós és négyzetesen integrálható függvények terén. Egy tetszőleges ilyen típusú függvény kifejezhető a (6.86) sajátfüggvények szerint.

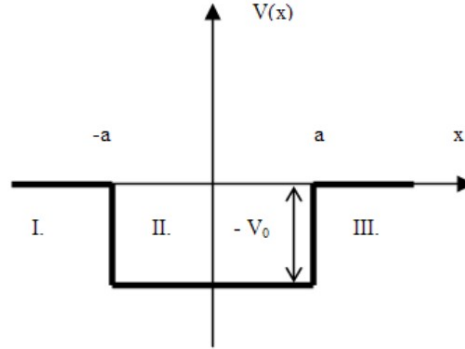
4. Az  $n = 0, 1, 2, 3 \dots$  kvantumszámhoz tartozó sajátfüggvénynek  $n$  zérushelye van a  $(-\infty, \infty)$  intervallumon.



**6.4. ábra:** Az első hat kvantumállapothoz tartozó hullámfüggvény és a megtalálhatósági valószínűség-sűrűség (jobb oldali oszlop) lineáris harmonikus oszcillátor esetén; (a bal oldali ábrákon  $\Psi$ , a jobb oldalin meg  $|\Psi|^2$ )

### 6.4.3 Végess mélységű potenciálvölgy

Tanulmányozzuk egy részecske viselkedését  $V_0$  mélységű potenciálgödörben. Legyen a rendszer potenciális energiája tehát  $V(x) = -V_0$ , ha  $|x| < a$ ,  $V(x) = 0$ , ha  $|x| > a$ . Tekintsük a  $-V_0 < E < 0$  esetet.



6.5. ábra: Végess mélységű potenciálvölgy

Mivel ebben az esetben a részecske végess mélységű potenciálgödörben található, nem állíthatjuk, hogy a  $(-a, a)$  tartományon kívül a hullámfüggvény mindig nulla. A három (I., II. és III. ) tartományban (6.5 ábra) a stacionárius Schrödinger-egyenlet:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} &= -|E| \psi_1(x); x < -a; \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_2(x)}{dx^2} &= (V_0 - |E|) \psi_2(x); |x| < a; \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_3(x)}{dx^2} &= -|E| \psi_3(x); x > a. \end{aligned} \quad (6.87)$$

Mivel a potenciális energiának egyetlen pontban sincs végtelen nagyságú ugrása, megköveteljük, hogy a hullámfüggvény minden pontban folytonos és folytonosan deriválható legyen. A folytonosság és deriválhatóság problémája a  $-a$  és  $a$  pontokban tevődik fel, és így a következő egyenleteket kapjuk:

$$\begin{aligned} \psi_1(-a) &= \psi_2(-a); \\ \psi_2(a) &= \psi_3(a); \\ \psi_1'(-a) &= \psi_2'(-a); \\ \psi_2'(a) &= \psi_3'(a). \end{aligned} \quad (6.88)$$

Tanulmányozzuk az  $E < V_0$  kötött állapotokat. Ilyen esetben a megoldásként kapott hullámfüggvények négyzetesen integrálhatók kell hogy legyenek, ami a következő feltételekhez vezet:

$$\begin{aligned}\lim_{x \rightarrow -\infty} \psi_1(x) &= 0; \\ \lim_{x \rightarrow \infty} \psi_3(x) &= 0;\end{aligned}\tag{6.89}$$

Figyelembe véve a fenti határfeltételeket és azt, hogy a potenciál mindhárom doméniumban konstans, a hullámfüggvényeket a következő alakban keressük:

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= A_1 e^{k_1 x}, \\ \psi_2(x) &= A_2 \cos(k_2 x) + B_2 \sin(k_2 x), \\ \psi_3(x) &= B_3 e^{-k_1 x},\end{aligned}\tag{6.90}$$

ahol a következő jelöléseket vezettük be:

$$\begin{aligned}k_1 &= \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}; \\ k_2 &= \sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}}.\end{aligned}\tag{6.91}$$

A (6.88) folytonossági és a deriválhatósági feltételeket alkalmazva a hullámfüggvényekre a következő egyenleteket kapjuk:

$$\begin{aligned}A_1 e^{-k_1 a} &= A_2 \cos(k_2 a) - B_2 \sin(k_2 a); \\ k_1 A_1 e^{-k_1 a} &= k_2 A_2 \sin(k_2 a) + k_2 B_2 \cos(k_2 a); \\ A_2 \cos(k_2 a) + B_2 \sin(k_2 a) &= B_3 e^{-k_1 a}; \\ -k_2 A_2 \sin(k_2 a) + k_2 B_2 \cos(k_2 a) &= -k_1 B_3 e^{-k_1 a}.\end{aligned}\tag{6.92}$$

Egyszerű számítások után (összeadva és kivonva az első és a harmadik, illetve a második és negyedik egyenletet), a következő egyenletekhez jutunk:

$$k_1 = k_2 \tan(k_2 a) \text{ ha } A_1 \neq -B_3 \text{ és } A_2 \neq 0;\tag{6.93}$$

$$-k_1 = k_2 \cot(k_2 a) \text{ ha } A_1 \neq B_3 \text{ és } B_2 \neq 0\tag{6.94}$$

$$\text{Bevezetjük most a következő változócseréket: } x = k_2 a; \quad y = k_1 a.\tag{6.95}$$

Ekkor a fenti egyenletek:

$$k_1 = k_2 \tan(k_2 a) \Leftrightarrow y = x \tan(x);\tag{6.96}$$

$$-k_1 = k_2 \cot(k_2 a) \Leftrightarrow y = -x \cot(x).\tag{6.97}$$

Azonnal észrevehető, hogy az  $x$  és  $y$  változókra fennállnak a következő egyenletek:

$$\begin{aligned}x^2 + y^2 &= a^2 (k_1^2 + k_2^2); \\ x^2 + y^2 &= a^2 \left( \frac{2m|E|}{\hbar^2} + \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} \right) \Rightarrow x^2 + y^2 = \frac{2ma^2 V_0}{\hbar^2} = R^2.\end{aligned}\tag{6.98}$$

Az  $y$  ismeretében az energiaértékek azonnal meghatározhatók, felhasználva a

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} y^2\tag{6.99}$$

egyenlőséget. A lehetséges  $y$  értékeket és ezáltal az energia sajátértékeit a következő görbék metszéspontjai adják meg:

$$\text{I.} \quad \begin{cases} y = x \tan(x) \\ x^2 + y^2 = R^2 \end{cases} \quad (6.100)$$

$$\text{II.} \quad \begin{cases} -y = x \cot(x) \\ x^2 + y^2 = R^2 \end{cases} \quad (6.101)$$

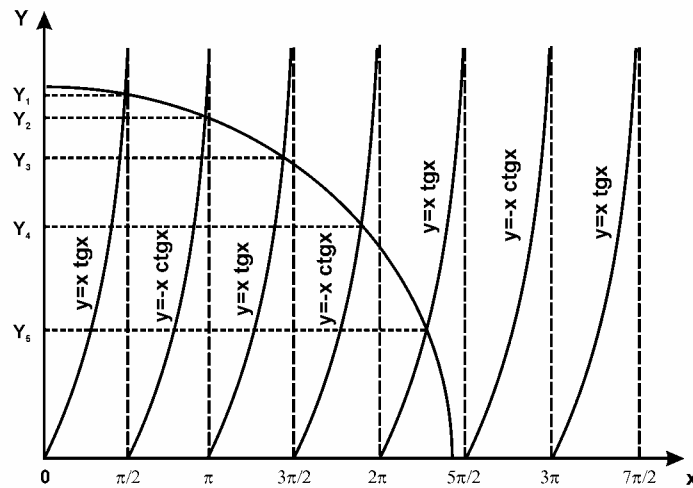
A (6.100) és (6.101) egyenletrendszereket grafikusan oldjuk meg (6.6 ábra).

A megoldásként kapott  $y$  pontok meghatározzák a lehetséges energia-sajátértékeket. A 6.6 ábra alapján a következő megjegyzéseket tehetjük:

1. A megengedett kötött állapotok száma a kör sugarától függ, vagyis az  $a^2 V_0$  szorzat értékétől. Az  $a$  és  $V_0$  értékek a potenciálgödör jellemzői. A potenciálgödör szélességének, illetve mélységének növelésével a megengedett kötött állapotok száma is nő. Határesetben, ha a potenciálgödör végtelen mély, akkor végtelen sok kötött állapot fog megvalósulni (végtelen mély potenciálvölgy esete). Mindaddig azonban, amíg az  $a^2 V_0$  szorzat véges, csak  $n$  darab véges számú kötött állapot valósul meg. Ha  $N$ -et úgy értelmezzük, hogy:

$$\frac{N}{2}\pi \leq R < \frac{N+1}{2}\pi, \text{ ahol } \frac{2ma^2 V_0}{\hbar^2} = R^2 \text{ és } N = 0, 1, 2, \dots \quad (6.102)$$

akkor  $n = N+1$  számú kötött állapot lesz lehetséges.

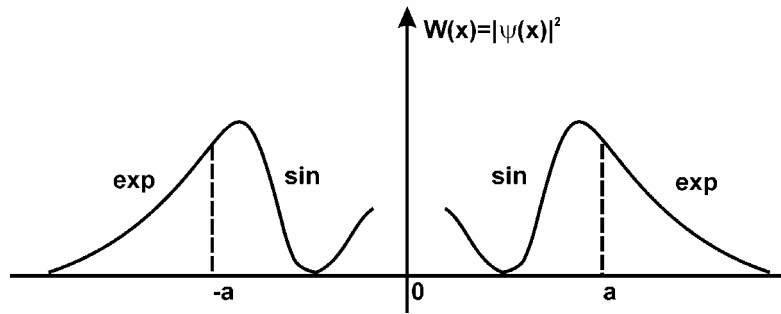


**6.6. ábra:** A (6.100) és (6.101) egyenletrendszerek grafikus megoldása

2. Vizsgáljuk most meg a hullámfüggvény modulusnégyzetét, vagyis a részecske tartózkodási valószínűség-sűrűségét a potenciálvölgy határain kívül:

$$\begin{aligned} |\psi_1|^2 &= A_1^2 e^{-2k_1 x} \neq 0; \\ |\psi_3|^2 &= B_3^2 e^{-2k_1 x} \neq 0. \end{aligned} \quad (6.103)$$

A részecskének tehát van nullától különböző megtalálhatósági valószínűsége a potenciálgödör falán kívül is. Ez a megtalálhatósági valószínűség azonban a klasszikus mechanika által meg nem engedett tartományban a behatolási távolsággal exponenciálisan csökken (6.7 ábra).



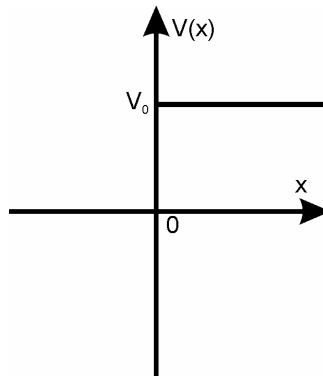
**6.7. ábra:** A megtalálhatósági valószínűség-sűrűség a potenciálgödrön kívül

## 6.5 Példák egydimenziós végtelen mozgások esetére

### 6.5.1 A potenciállépcső

Vizsgáljuk most azt az esetet, amikor egy kvantummechanikai részecske a  $V_0$  „magas” potenciállépcső terében mozog (6.8 ábra). A potenciális energia alakja a következő:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_0, & x \geq 0 \end{cases} \quad (6.104)$$



**6.8. ábra:** A potenciállépcső

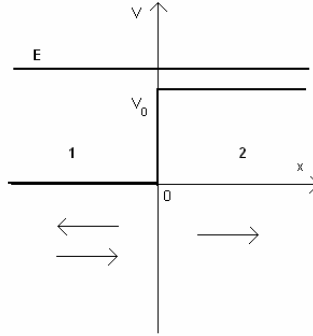
A stacionárius Schrödinger-egyenlet, amit ebben az esetben meg kell oldani:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} = [E - V(x)] \Psi(x). \quad (6.105)$$

Két különböző esetet fogunk tárgyalni: a részecske összenergiája ( $E$ ) 1) nagyobb  $V_0$ -nál ( $E > V_0$ ); vagy 2) kisebb  $V_0$ -nál ( $E < V_0$ ). Akárcsak a klasszikus mechanikában, a két esetben a részecske eltérően viselkedik. Feltételezzük, hogy egy részecskeáramunk van, amelyben a részecskék balról érkeznek a potenciállépcsőre.

1. eset:  $E > V_0$  (részleges visszaverődés)

Ha a részecskék balról érkeznek a potenciállépcsőre, klasszikusan azt várnánk el, hogy a részecskék mozgási energiájuk csökkentésével mind továbbhaladnak a  $V_0$  potenciállal jellemzett tartományba. Lássuk, mi történik a kvantummechanikában.



**6.9. ábra:**  $E > V_0$  eset (potenciállépcső)

A hullámfüggvényt két tartományban írjuk fel, a lépcső bal-, illetve jobb oldalán

$$\Psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, & x < 0 \\ A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, & x \geq 0 \end{cases} \quad (6.106)$$

ahol:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}; \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad (6.107)$$

Mivel a részecskék balról érkeznek a potenciállépcsőre  $B_2 = 0$ , ugyanis nincs olyan síkhullámunk, amely a  $+\infty$  irányból terjed a  $-\infty$  irányba. Ezen esetben beszélhetünk egy beeső, egy áteresztett és egy visszavert hullámról (vagy részecskeáramról). A beeső részecskeáramot az  $A_1$ -es amplitudójú, a visszavert részecskeáramot a  $B_1$ -es amplitudójú, a potenciállépcsőn áthaladó részecskeáramot pedig az  $A_2$ -es amplitudójú tag írja le.

Mivel a potenciálnak véges nagyságú ugrása van, az összhullámfüggvény folytonos és deriválható kell legyen  $x = 0$ -ban, vagyis:

$$\begin{aligned}\psi_1(0) = \psi_2(0) &\Rightarrow A_1 + B_1 = A_2 \\ \psi_1'(0) = \psi_2'(0) &\Rightarrow k_1(A_1 - B_1) = k_2 A_2\end{aligned}\quad (6.108)$$

A fenti két egyenletből kifejezhető  $B_1$  és  $A_2$  az  $A_1$  függvényében (meglátjuk azonban, hogy a potenciállépcsőről való visszaverődés tanulmányozásához csak a  $B_1/A_1$  és  $A_2/A_1$  arányokra lesz szükség). Másrészt, az egyszerűség kedvéért tekinthetjük úgy, hogy  $A_1 = 1$ . Így a  $B_1$  és  $A_2$  együttthatókra azonnal kapjuk, hogy:

$$B_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}; \quad A_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}. \quad (6.109)$$

Behelyettesítve a (6.109) együttthatókat, a hullámfüggvények alakja az 1. és 2. tartományban:

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= e^{ik_1 x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1 x} = \psi_{be}(x) + \psi_R(x); \\ \psi_2(x) &= \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x} = \psi_T(x).\end{aligned}\quad (6.110)$$

$$\text{A beeső részecskék hullámfüggvénye: } \psi_{be}(x) = e^{ik_1 x}. \quad (6.111)$$

$$\text{A visszavert részecskék hullámfüggvénye: } \psi_R(x) = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1 x}. \quad (6.112)$$

$$\text{Az áteresztett részecskék hullámfüggvénye: } \psi_T(x) = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x}. \quad (6.113)$$

Arra keressük a választ, hogy a beeső részecskék valószínűségi áramsűrűségének mekkora része verődik vissza a potenciállépcsőről, és mekkora része halad át a potenciállépcsőn. Mind a beérkező, mind a visszavert és áteresztett hullámfüggvényre kiszámítjuk az áramsűrűséget:

$$j = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right), \quad (6.114)$$

és értelmezzük a visszaverődési (reflexiós) és áteresztési (transzmissziós) tényezőket:

$$R = \frac{|j_R|}{|j_{be}|}; \quad T = \frac{|j_T|}{|j_{be}|}. \quad (6.115)$$

Egyszerű számítások után azonnal adódik, hogy:

$$j_{be} = |A_1|^2 \frac{k_1 \hbar}{m}, \quad (6.116)$$

$$j_R = -|B_1|^2 \frac{k_1 \hbar}{m} = -\frac{k_1 \hbar}{m} \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, \quad (6.117)$$

$$j_T = |A_2|^2 \frac{k_2 \hbar}{m} = \frac{k_2 \hbar}{m} \frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (6.118)$$

A fenti valószínűségi áramsűrűségekből a visszaverődési és átterjesztési tényezők azonnal kiszámíthatók:

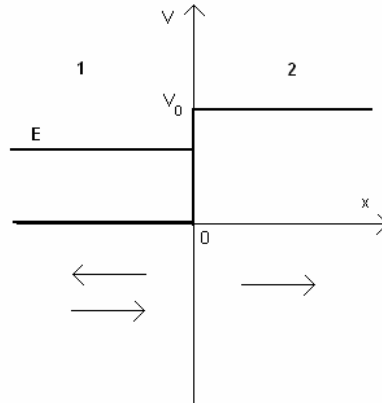
$$R = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 = 1 - \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}; \quad T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (6.119)$$

Belátható, hogy  $R+T=1$ , ahogy ezt el is várjuk, ugyanis egy részecske vagy áthalad a potenciállépcsőn, vagy visszaverődik. A  $T$  átterjesztési együttható megadja a potenciállépcsőn való áthaladás valószínűségét. Az  $R$  visszaverődési együttható a potenciállépcsőről való visszaverődés valószínűségét jelenti.

A klasszikus mechanika elvárásaival ellentétben, véges valószínűsége van annak, hogy a részecske visszaverődik a potenciállépcsőről, annak ellenére, hogy a részecske összenergiája ( $E$ ) nagyobb, mint a potenciállépcső magassága.

## 2. eset $E < V_0$ (teljes visszaverődés)

Klasszikusan azt várnánk el, hogy a részecskék mind visszaverődnek a potenciállépcsőről. Lássuk, mit kapunk a kvantummechanika keretében.



**6.10. ábra:** Potenciállépcső az  $E < V_0$  esetben.

A Schrödinger-egyenletünk ugyanaz marad (6.105), és a megoldás csak a 2. tartományban változik meg. Ebben a tartományban az előző megoldásoktól

különböző két független megoldást kapunk. Ezek közül csak azt tekintjük, amely a végtelenben nullához tart ( $A_2 = 0$ ):

$$\Psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, & x < 0; \\ A_2 e^{\rho_2 x} + B_2 e^{-\rho_2 x}, & x \geq 0. \end{cases} \quad (6.120)$$

A fenti egyenletben a következő új jelölést vezettük be:

$$\rho_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}. \quad (6.121)$$

A számításokat az előző esethez hasonlóan végezzük, alkalmazva a folytonossági feltételeket a két tartomány határán. Innen azonnal adódik, hogy:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = B_2 \\ ik_1(A_1 - B_1) = B_2 \rho_2 \end{cases} \quad (6.122)$$

Az  $A_1 = 1$  feltétellel élve a  $B_1$  és  $B_2$  együtthatókra azt kapjuk, hogy:

$$B_1 = \frac{ik_1 - \rho_2}{ik_1 + \rho_2}; \quad B_2 = \frac{2ik_1}{ik_1 + \rho_2}. \quad (6.123)$$

Az  $E > V_0$  esethez hasonlóan újból kiszámíthatjuk az áramsűrűségeket, illetve a reflexiós és transzmissziós tényezőket. Azonnal észrevehető, hogy:

$$\psi_T(x) = B_2 e^{-\rho_2 x} = \psi_T^*(x) \Rightarrow j_T = 0 \Rightarrow T = 0; \quad (6.124)$$

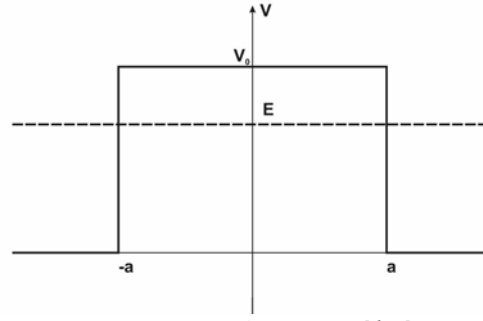
$$R = |B_1|^2 = \left| \frac{ik_1 - \rho_2}{ik_1 + \rho_2} \right|^2 = 1. \quad (6.125)$$

A klasszikus mechanika törvényeivel összhangban teljes visszaverődés történik. A különbség az, hogy a kvantummechanika megengedi a részecskének, hogy bizonyos mélységig behatoljon a 2-es tartományba is, ugyanis:

$$|\psi_T(x)|^2 = |B_2|^2 e^{-2\rho_2 x} \neq 0. \quad (6.126)$$

Látható, hogy a hullámfüggvény és a részecske megtalálhatósági valószínűségi sűrűsége exponenciálisan csökken, és nem lesz azonnal nulla a potenciállépcső jobboldalán. Ennek a fontosságát a potenciálgát tanulmányozásakor értjük meg, ugyanis ez a jelenség teszi lehetővé majd az alagúthatást.

## 6.5.2 A potenciálgát és az alagúthatás



6.11. ábra. A potenciálgát

A potenciálgátban a potenciális energia alakját a 6.11 ábra szemlélteti, és matematikailag a következő függvény írja le:

$$V(x) = \begin{cases} 0 \rightarrow x \in (-\infty, -a) \\ V_0 \rightarrow x \in [-a, a] \\ 0 \rightarrow x \in (a, \infty) \end{cases} \quad (6.127)$$

(Az egyszerűség kedvéért a potenciálgátat az  $x = 0$  pontra szimmetrikusan vettük fel.) Legyen egy részecske, amely a  $-\infty$ -ből jön, és a potenciálgátra esik. A részecske különböző összenergiáira keressük a potenciálgátról való visszaverődés, illetve a potenciálgáton való áthatolás valószínűségét.

1.) Tekintsük először az  $E < V_0$  esetet.

Klasszikusan azt várnánk el, hogy a részecske visszaverődik a potenciálgátról, ugyanis nincs elegendő mozgási energiája ahhoz, hogy a  $V = V_0$  potenciális energiával rendelkező doméniumba behatoljon.

A Schrödinger-egyenlet megoldása a potenciális energiát megadó három intervallumon

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \rightarrow (x < -a), \\ Ce^{-gx} + De^{gx} \rightarrow (-a < x < a), \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \rightarrow (a < x), \end{cases} \quad (6.128)$$

ahol:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}; \quad g = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}. \quad (6.129)$$

Az  $x = -a$  pontban a folytonossági és deriválhatósági feltételek alapján:

$$\begin{aligned}
Ae^{-ika} + Be^{ika} &= Ce^{ga} + De^{-ga}; \\
Ae^{-ika} - Be^{ika} &= \frac{ig}{k}(Ce^{ga} - De^{-ga}).
\end{aligned} \tag{6.130}$$

A fenti egyenletek felírhatók mátrixegyenlet alakban is:

$$\begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ e^{-ika} & -e^{ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ga} & e^{-ga} \\ \frac{ig}{k}e^{ga} & -\frac{ig}{k}e^{-ga} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}. \tag{6.131}$$

A bal oldali tagban szereplő négyzetes mátrix inverzét véve írhatjuk, hogy:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{ika} & e^{ika} \\ e^{-ika} & -e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ga} & e^{-ga} \\ \frac{ig}{k}e^{ga} & -\frac{ig}{k}e^{-ga} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}, \tag{6.132}$$

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1 + \frac{ig}{k})e^{ga+ika} & (1 - \frac{ig}{k})e^{-ga+ika} \\ (1 - \frac{ig}{k})e^{ga-ika} & (1 + \frac{ig}{k})e^{-ga-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}. \tag{6.133}$$

Hasonlóan járunk el az  $x=a$  pontban is:

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1 - \frac{ik}{g})e^{ga+ika} & (1 + \frac{ik}{g})e^{ga-ika} \\ \frac{ik}{g}e^{ga+ika} & \frac{ik}{g}e^{ga-ika} \\ (1 + \frac{ik}{g})e^{-ga+ika} & (1 - \frac{ik}{g})e^{-ga-ika} \\ \frac{ik}{g}e^{-ga+ika} & \frac{ik}{g}e^{-ga-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}. \tag{6.134}$$

Kombinálva most a (6.133) és (6.134) összefüggéseket, azonnali algebrai számítások után a potenciálgát két oldalán levő hullámfüggvényre egy mátrixegyenletet kapunk:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [\cosh(2ga) + \frac{i\alpha}{2}\sinh(2ga)]e^{2ika} & \frac{i\beta}{2}\sinh(2ga) \\ -\frac{i\beta}{2}\sinh(2ga) & [\cosh(2ga) - \frac{i\alpha}{2}\sinh(2ga)]e^{-2ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \tag{6.135}$$

ahol:

$$\alpha = \frac{g}{k} - \frac{k}{g} \text{ és } \beta = \frac{g}{k} + \frac{k}{g}. \tag{6.136}$$

Ha úgy tekintjük, hogy a részecskék csak a  $-\infty$  irányból esnek a potenciálgátra, akkor a  $\infty$ -ból jövő részecskékhez rendelt síkhullám együtthatója nulla kell legyen, vagyis:  $G = 0$ . A potenciállépcsőhöz hasonlóan értelmezhető a potenciálgátról visszaverődő és a potenciálgáton áthaladó részecskékhez rendelt síkhullám, illetve az ezeknek megfelelő valószínűségi áramsűrűségek:

$$j_{be} = |A|^2 \frac{k\hbar}{m}, \quad j_R = -|B|^2 \frac{k\hbar}{m}, \quad j_T = |F|^2 \frac{k\hbar}{m}. \tag{6.137}$$

A potenciállépcsőhöz hasonlóan értelmezhetjük az  $R$  reflexiós és  $T$  transzmissziós együtthatókat, amelyek összege szintén 1-et kell adjon ( $R+T=1$ ).

$$R = \frac{|j_R|}{|j_{be}|} = \frac{|B|^2}{|A|^2}; \quad T = \frac{|j_T|}{|j_{be}|} = \frac{|F|^2}{|A|^2}. \quad (6.138)$$

$T$  és  $R$  megadja a potenciálgáton való áthaladás, illetve potenciálgátról való visszaverődés valószínűségét. A (6.135) alapján következik  $F/A$  értéke

$$\frac{F}{A} = \frac{e^{-2ika}}{\cosh(2ga) + \frac{i\alpha}{2} \sinh(2ga)}, \quad (6.139)$$

és ezáltal a transzmissziós együttható:

$$T = \frac{1}{[\cosh(2ga)]^2 + [\sinh(2ga)]^2 \alpha^2 / 4} = \frac{4k^2 g^2}{(k^2 + g^2)^2 [\sinh(2ga)]^2 + 4k^2 g^2}. \quad (6.140)$$

A fenti képlet alapján észrevehető, hogy az  $E < V_0$  esetben is létezik egy nullától különböző valószínűsége annak, hogy a részecske áthatoljon a potenciálgáton. A kvantumos viselkedés tehát lényegesen különbözik attól, amit klasszikusan elvárnánk. A klasszikus mechanika törvényeinek az értelmében a részecske mindig vissza kellene hogy verődjen a potenciálgátról. A kvantummechanikában ezt a jelenséget *alagúthatásnak*, vagy idegen kifejezést használva „*tunnel effektusnak*” nevezzük. A reflexiós együttható értéke következik, felhasználva, hogy:

$$R = 1 - T = \frac{(k^2 + g^2)^2 [\sinh(2ga)]^2}{(k^2 + g^2)^2 [\sinh(2ga)]^2 + 4g^2 k^2}. \quad (6.141)$$

Annak érdekében, hogy a potenciálgáton való áthatolási valószínűségre egy fizikailag könnyebben értelmezhető képletet nyerjünk, vizsgáljunk néhány speciális és egyszerűbb esetet:

a. Legyen a potenciálgát magas ( $V_0 \gg E$ ) és széles úgy, hogy  $ga \gg 1$ . Ilyen feltételek mellett a (6.140) összefüggés egyszerűbb alakra hozható, ugyanis

$$\cosh(2ga) \approx \sinh(2ga) \approx \frac{e^{2ga}}{2}, \quad (6.142)$$

és következik, hogy:

$$T = 16e^{-4ga} \left( \frac{gk}{g^2 + k^2} \right)^2. \quad (6.143)$$

A transzmissziós együttható (6.143) alakjából látható, hogy a potenciálgáton való áthatolási valószínűség exponenciálisan csökken a potenciálgát  $2a$  vastagságával. Az áthatolási valószínűség ugyanakkor nagyon gyorsan csökken a  $g$  értékének (vagyis a  $V_0 - E$  különbségnek) a növekedésével.

b. Egy másik könnyen tanulmányozható határeset, amikor a potenciálgát nagyon magas, de keskeny. Ez matematikailag a  $g \gg k$  és  $ga \ll 1$  esetnek felel meg. Ilyenkor a  $\sinh(2ga)$  sorbafejthető:  $\sinh(2ga) \approx 2ga$ , és azt kapjuk, hogy:

$$T = \frac{k^2}{k^2 + g^4 a^2}. \quad (6.144)$$

2.) Tanulmányozzuk most az  $E > V_0$  esetet. A klasszikus mechanika alapján ilyenkor a részecske mindig áthalad a potenciálgáton, a potenciálgáton lecsökkentve a mozgási energiáját.

A Schrödinger-egyenlet újból felírható a potenciális energiát meghatározó három intervallumon

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \rightarrow (x < -a) \\ Ce^{-igx} + De^{igx} \rightarrow (-a < x < a) \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \rightarrow (a < x) \end{cases} \quad (6.145)$$

ahol:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}; \quad g = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}. \quad (6.146)$$

A rendszert hasonlóan tanulmányozzuk, mint az  $E < V_0$  esetben. A folytonossági és deriválhatósági feltételek felírása után az  $x = \pm a$  pontokban a (6.135)-höz hasonló egyenlethez jutunk, amely kapcsolatot teremt a potenciálgát két oldalán levő hullámfüggvény között. Feltételezve, hogy a részecskék megint csak a  $-\infty$  irányból haladnak a potenciálgát felé, felírható, hogy  $G = 0$ . A beeső részecskék, a potenciálgáton áthaladó és a potenciálgátról visszaverődő részecskék hullámfüggvénye mind síkhullám. A (6.139)-hez hasonlóan kifejezhetjük  $F$ -et az  $A$  függvényében, ahonnan a  $T$  transzmissziós együtthatóra az kapjuk, hogy:

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{4k^2 g^2}{(k^2 - g^2)^2 \sin^2(ga) + 4k^2 g^2}. \quad (6.147)$$

Mivel a valószínűségi áramsűrűség ebben a esetben is megmarad,  $R = 1 - T$ , következik, hogy:

$$R = \frac{(k^2 - g^2)^2 \sin^2(ga)}{(k^2 - g^2)^2 \sin^2(ga) + 4k^2 g^2}. \quad (6.148)$$

Az  $R$  és  $T$  mennyiségeknek valószínűségi értelmezést adhatunk.  $T$  annak a valószínűsége, hogy az  $E > V_0$  energiával rendelkező részecske áthaladjon a potenciálgáton,  $R$  pedig annak a valószínűsége, hogy a részecske visszaverődjön a potenciálgátról. Látható, hogy a kvantummechanikában a

klasszikus mechanikától eltérően általában  $R \neq 0$ , amiből az következik, hogy az  $E > V_0$  esetben is véges valószínűsége van annak, hogy a részecske a potenciálgátról visszaverődjön. A potenciálgát csak akkor teljesen áteresztő ( $R = 0$ ), ha:

$$\sin(ga) = 0 \Rightarrow ga = n\pi. \quad (6.149)$$

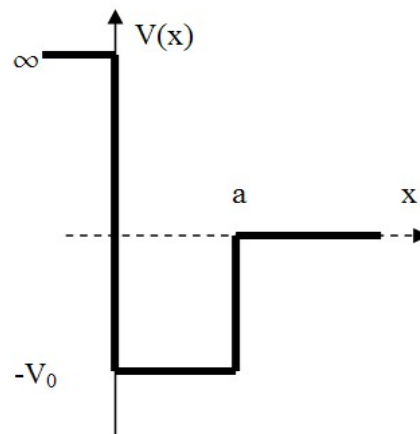
Akárcsak a vékony lemezekre eső fénysugarak esetén, tökéletes áteresztést kapunk, ha a potenciálgát szélessége a hullámhossz felének egész számú többszöröse. Ezt a jelenséget felhasználhatjuk arra, hogy egy részecske-áramból optimálisan kiválasszunk egy kívánt energiájú komponenst.

3.) Az  $E = V_0$  eset. Ezt a határesetet megkaphatjuk a (6.140–141), vagy a (6.147–148) összefüggésekből a  $g = 0$  helyettesítéssel:

$$R = \frac{mV_0a^2}{2\hbar^2 + mV_0a^2}; \quad T = \frac{2\hbar^2}{2\hbar^2 + mV_0a^2}. \quad (6.150)$$

## 6.6 Javasolt feladatok

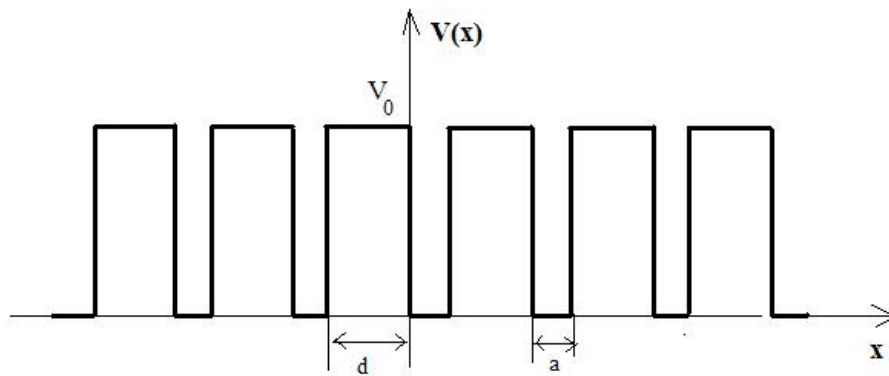
1. Tanulmányozzuk egy olyan  $m$  tömegű kvantummechanikai részecske stacionárius állapotait, amely az  $a, b, c$  méretű dobozba van bezárva.
2. Tanulmányozzuk egy  $m$  tömegű kvantummechanikai részecske stacionárius állapotait a 6.12 ábrán bemutatott potenciálvölgyben.



6.12. ábra

3. Igazoljuk, hogy a 6.13 ábrán látható periodikus potenciáltérben mozgó részecske energiaspektruma sávszerkezetű. Az egyszerűség kedvéért vizsgáljuk

a  $\frac{\sqrt{2mV_0}d}{\hbar} \ll 1$ ,  $a \gg d$  és  $E \ll V_0$  határesetet!



**6.13. ábra**

4. Határozzuk meg a  $J$  tehetetlenségi nyomatékkal rendelkező rotátor stacionárius állapotainak a hullámfüggvényeit és energiaszintjeit. (A rotátor egy adott tengely körül forgó merev test, melynek a forgástengelyre vonatkozóan ismert a  $J$  tehetetlenségi nyomatéka. A rotátor energiája  $E = \frac{L_z^2}{2J}$ , ahol  $L_z$  a forgástengelyre vonatkoztatott impulzusnyomaték.)

## 7. FEJEZET

### Az impulzusnyomaték a kvantummechanikában

A klasszikus mechanikában a centrális erőterben való mozgás esetén az impulzusnyomatéknak mint mozgásállandónak kitüntetett szerepe van. A centrális erőterben való mozgás esetén (például elektronok az atommag elektrosztatikus terében) az impulzusnyomatéknak kitüntetett szerepe van a kvantummechanikában is. Meglátjuk azonban, hogy a kvantummechanikában az impulzusnyomaték-vektor tulajdonságai számos tekintetben eltérnek a klasszikusan megszokottól.

#### 7.1 Az impulzusnyomaték-operátor tulajdonságai, kommutálási relációk

A klasszikus mechanikában az impulzusnyomaték-vektor

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} = \vec{i}(yp_z - zp_y) + \vec{j}(zp_x - xp_z) + \vec{k}(xp_y - yp_x), \quad (7.1)$$

és a tengelyek menti komponensei:

$$\begin{cases} L_x = yp_z - zp_y \\ L_y = zp_x - xp_z \\ L_z = xp_y - yp_x \end{cases} \quad (7.2)$$

A kvantummechanikában a fizikai mennyiségeket a nekik megfelelő operátorokkal helyettesítjük. Felhasználva az impulzus- és térkoordinátákhoz rendelt operátorok alakját, meghatározható az impulzusnyomaték-operátor alakja:

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = -i\hbar \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix} = \vec{i}(-i\hbar)(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}) + \vec{j}(-i\hbar)(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}) + \vec{k}(-i\hbar)(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}). \quad (7.3)$$

Innen az impulzusnyomaték-operátor komponenseire azonnal adódik, hogy:

$$\begin{cases} \hat{L}_x = (-i\hbar) \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ \hat{L}_y = (-i\hbar) \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ \hat{L}_z = (-i\hbar) \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{cases} \quad (7.4)$$

Az  $\hat{L}_x, \hat{L}_y$  és  $\hat{L}_z$  operátorokra bizonyíthatók a következő kommutálási relációk (gyakorlatként javasoljuk ezeknek a bizonyítását):

$$\begin{cases} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \\ [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y \end{cases} \quad (7.5)$$

A (7.5) kommutálási relációk értelmében nem lehet egyszerre és egzaktul meghatározni az impulzusnyomaték két komponensét (a komponensekhez rendelt operátorok egymással nem kommutálnak). A klasszikus mechanikától eltérően a kvantummechanikában az impulzusnyomaték-vektort nem tudjuk egzaktul mérni. A kvantummechanika keretében egy adott állapotban egyszerre mérhető az impulzusnyomaték négyzete  $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ , (7.6)

és az impulzusnyomaték egyik tengely irányú komponense (általában  $L_z$ ), ugyanis:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0. \quad (7.7)$$

Gyakorlatként javasoljuk a (7.7) kommutálási relációk bizonyítását. Keressük tehát az  $\hat{L}^2$  és  $\hat{L}_z$  operátorok közös sajátfüggvényeit:

$$\hat{L}^2 \Psi(\vec{r}) = c_1 \Psi(\vec{r}), \quad \hat{L}_z \Psi(\vec{r}) = c_2 \Psi(\vec{r}). \quad (7.8)$$

Attérünk gömbi koordinátákra:

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \phi \\ y = r \sin \theta \sin \phi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad (7.9)$$

A gömbi koordinátákhoz tartozó egységvektorok kifejezhetők a Descartes-koordinátarendszerben használt egységvektorok segítségével:

$$\begin{cases} \vec{e}_r = \sin \theta \cos \phi \vec{i} + \sin \theta \sin \phi \vec{j} + \cos \theta \vec{k} \\ \vec{e}_\theta = \cos \theta \cos \phi \vec{i} + \cos \theta \sin \phi \vec{j} - \sin \theta \vec{k} \\ \vec{e}_\phi = -\sin \phi \vec{i} + \cos \phi \vec{j} \end{cases} \quad (7.10)$$

Az impulzusnyomaték-operátor

$$\hat{L} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = (\vec{e}_r \cdot \vec{r}) \times (-i\hbar \nabla) \quad (7.11)$$

gömbi koordinátákba való átírásához át kell írni először a gradienst gömbi koordinátákba:

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k}, \quad (7.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial x}, \quad (7.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial y}, \quad (7.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial z}. \quad (7.15)$$

Egyszerű algebrai számítások elvégzése után következik, hogy:

$$\rightarrow \nabla = \vec{\varepsilon}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{\varepsilon}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{\varepsilon}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (7.16)$$

Megjegyzés: A (7.16) képletben vigyázni kell arra, hogy az egységvektorokat az operátorok elé írjuk, mert a Descartes-koordinátáktól eltérően a gömbi koordinátarendszerben használt egységvektorok nem tekinthetők állandóknak a koordinátákkal való deriválásra nézve. Értelmezés alapján egy operátor mindenre hat, ami az adott tagban tőle jobbra következik. Ha a tagok végére íránk az egységvektort, ez azt jelentené, hogy az operátor erre is hat, ami teljesen más eredményhez vezetne.

Gömbi koordinátákat használva, felírhatjuk most az impulzusnyomaték-operátort:

$$\begin{aligned} \hat{L} = (\vec{\varepsilon}_r \cdot r) \times (-i\hbar \nabla) &= -i\hbar \begin{vmatrix} \vec{\varepsilon}_r & \vec{\varepsilon}_\theta & \vec{\varepsilon}_\phi \\ r & 0 & 0 \\ \frac{\partial}{\partial r} & \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} & \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \end{vmatrix} = \\ &= -i\hbar \left( \vec{\varepsilon}_\theta \left( \frac{-1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \vec{\varepsilon}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right). \end{aligned} \quad (7.17)$$

Ahhoz, hogy a (7.17)-ből megkapjuk az  $L_x$ ,  $L_y$  és  $L_z$  mennyiségekhez rendelt operátorok alakját gömbi koordinátákban, be kell helyettesíteni az egységvektorok (7.10) alakját. Egyszerű algebrai számításokkal azonnal adódik

$$\hat{L} = -i\hbar \left( (\cos \theta \cos \phi \vec{i} + \cos \theta \sin \phi \vec{j} - \sin \theta \vec{k}) \left( \frac{-1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + (-\sin \phi \vec{i} + \cos \phi \vec{j}) \frac{\partial}{\partial \theta} \right), \quad (7.18)$$

ahonnan:

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left( -\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right), \quad (7.19)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left( \cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right), \quad (7.20)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial\phi} \right). \quad (7.21)$$

A gömbi koordináták használatának az előnye, hogy két koordinátával ( $\phi$  és  $\theta$ ) tanulmányozható az impulzusnyomaték, nem pedig hárommal, mint a Descartes-koordináták esetén. Azonnal meghatározható az impulzusnyomaték-négyzet operátor is:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}\hat{L} = -\hbar^2 \left( \vec{\varepsilon}_\theta \left( \frac{-1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right) + \vec{\varepsilon}_\phi \frac{\partial}{\partial\theta} \right) \left( \vec{\varepsilon}_\theta \left( \frac{-1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right) + \vec{\varepsilon}_\phi \frac{\partial}{\partial\theta} \right). \quad (7.22)$$

Felhasználva, hogy

$$\begin{cases} \vec{\varepsilon}_\theta = \cos\theta \cos\phi \vec{i} + \cos\theta \sin\phi \vec{j} - \sin\theta \vec{k} \\ \vec{\varepsilon}_\phi = -\sin\phi \vec{i} + \cos\phi \vec{j} \end{cases}, \quad (7.23)$$

$$\frac{\partial}{\partial\phi} \vec{\varepsilon}_\theta = -\cos\theta \sin\phi \vec{i} + \cos\theta \cos\phi \vec{j} = \cos\theta \vec{\varepsilon}_\phi, \quad (7.24)$$

$$\frac{\partial}{\partial\theta} \vec{\varepsilon}_\phi = 0, \quad (7.25)$$

és elvégezve a számításokat:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right) = -\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right). \quad (7.26)$$

## 7.2 Sajátértékek és sajátfüggvények

Keressük tehát az  $\hat{L}^2$  és  $\hat{L}_z$  operátoroknak a közös sajátfüggvényrendszerét, gömbi koordinátákat használva:

$$\hat{L}^2 \Phi(\theta, \phi) = c_1 \Phi(\theta, \phi), \quad (7.27)$$

$$\hat{L}_z \Phi(\theta, \phi) = c_2 \Phi(\theta, \phi). \quad (7.28)$$

A feladat a fizika matematikai egyenletei tárgyköréből ismert. A közös  $\Phi(\theta, \phi)$  sajátfüggvényrendszer az  $Y_l^m(\theta, \phi)$  gömbfüggvények, amelyek két  $l$  és  $m$  kvantumszámmal jellemezhetők:

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi), \quad (7.29)$$

$$\hat{L}_z Y_l^m(\theta, \phi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \phi). \quad (7.30)$$

Az  $l$  kvantumszám tetszőleges természetes szám lehet,  $m$  pedig egész szám  $-l$  és  $l$  között.

$$l = 0, 1, 2, \dots; \quad m = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l. \quad (7.31)$$

Minden sajátértékhez több sajátfüggvény tartozhat. Az  $Y_l^m(\theta, \phi)$  gömbfüggvények megadhatók mint:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos\theta). \quad (7.32)$$

A fenti egyenletben  $P_l^m$  az  $l$ -edrendű általánosított Legendre-polinom, amit a

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l, \quad (7.33)$$

Legendre-polinomból  $m$ -edrendű deriválással kapjuk meg (ha  $m$  pozitív szám):

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2 - 1)^l. \quad (7.34)$$

A negatív  $m$  értékekhez tartozó gömbfüggvények megkaphatók felhasználva az

$$Y_l^{-m} = (-1)^m (Y_l^m)^*, \quad (7.35)$$

összefüggést. Az első ( $l = 0, 1, 2$ ) kvantumszámokhoz tartozó gömbfüggvények:

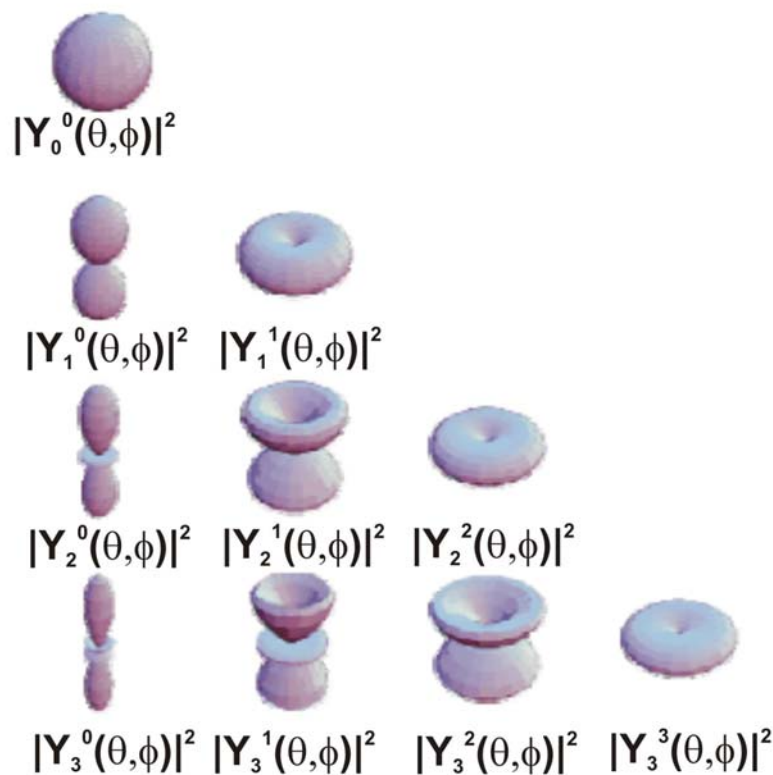
$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad (7.36)$$

$$Y_1^{\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi}, \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta, \quad (7.37)$$

$$Y_2^{\pm 2} = \pm \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}, \quad Y_2^{\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\phi},$$

$$Y_2^0 = \pm \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left( \frac{3}{2} \cos^2\theta - \frac{1}{2} \right), \quad (7.38)$$

A gömbfüggvények modulusnégyzete  $\phi$  és  $\theta$ -tól függő valós szám. Ezt szoktuk általában grafikusan ábrázolni radiális, háromdimenziós ábrázolásmódot használva. A tér minden ( $\theta \in [0, \pi), \phi \in [0, 2\pi)$ ) szögekkel jellemzett irányában felvesszünk az origótól  $r = |Y_l^m(\theta, \phi)|^2$  távolságra levő pontot. Ezen pontok összessége egy felületet határoz meg, amely szimmetrikus az origóra nézve. Az  $l = 0, 1, 2, 3$  esetekben a  $|Y_l^m(\theta, \phi)|^2$ -nek az ilyen típusú ábrázolása a 7.1 ábrán adott.



**7.1. ábra** Gömbfüggvények modulusnégyzetének ábrázolása  $l = 0, 1, 2$  és  $3$  esetekben

A (7.32) gömbfüggvényekre a következő normálási és teljességi összefüggések érvényesek:

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_l^m(\theta, \phi) (Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi))^* = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (7.39)$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (Y_l^m(\theta, \phi))^* Y_l^m(\theta, \phi) = \delta(\phi - \phi') \delta(\cos \theta - \cos \theta'). \quad (7.40)$$

A fentiek alapján könnyen belátható, hogy a gömbfüggvények egy bázist alkotnak a  $(\theta, \phi)$  szögváltozós és a  $(\theta \in [0, \pi), \phi \in [0, 2\pi))$  intervallumon négyzetesen integrálható komplex függvények terén.

Annak érdekében, hogy ne veszítsük el a fizikai értelmet a matematikai formulák között, foglaljuk most össze röviden mindazt, amit megtanultunk a kvantummechanikai impulzusnyomatékról:

1. A kvantummechanikában nem tudjuk egzaktul meghatározni az  $L$  impulzusnyomaték-vektort.
2. A kvantummechanikában egy adott kvantummechanikai állapotban egyszerre és egzaktul mérhető az  $L^2$  és  $L_z$  értéke.
3. Az  $L^2$  értéke kvantált, a lehetséges értékeket a  $\hbar^2 l(l+1)$  összefüggés adja meg, ahol  $l = 0, 1, 2, \dots$ . Rögzített  $l$ -hez tartozó sajátértékek  $(2l+1)$ -szeresen elfajultak. Az  $L^2$  sajátállapotai közül bármelyik az  $L_z$ -nek is sajátállapota. Az  $L_z$  lehetséges értékei is kvantáltak, értékeit az  $m\hbar$  összefüggés adja meg.
4. Ha nem az  $L_z$  értékét, hanem az  $L_x$  vagy  $L_y$  értékét mérnénk, ezek is ugyanúgy kvantáltak, mint az  $L_z$ , vagyis értékük  $m\hbar$  lehet. Ez szimmetria-megfontolások alapján azonnal következik, ugyanis a  $z$  tengely irányát tetszőlegesen választhatjuk meg. A klasszikus mechanikától eltérően a kvantummechanikában az impulzusnyomaték komponensei közül azonban csak az egyik határozható meg egzaktul.

### 7.3 Javasolt feladatok

1. Írjuk át a gradiens operátort gömbi koordinátákba (Bizonyítsuk be a (7.16) képletet).
2. Számítsuk ki az alábbi kommutátorokat (ahol  $i, j \rightarrow x, y, z$ ):
  - a.)  $[\hat{L}_i, \hat{L}_j], [\hat{L}^2, \hat{L}_i],$
  - b.)  $[\hat{L}_i, \hat{x}_j], [\hat{L}_i, \hat{p}_j],$
  - c.)  $[\hat{L}_i, \hat{p}^2], [\hat{L}_i, \hat{r}^2].$
3. Igazoljuk, hogy ha  $\Psi$  sajátfüggvénye az  $\hat{L}_z$  operátornak, akkor a  $\Psi$  kvantummechanikai állapotban az  $L_x$  és  $L_y$  várható (átlag) értéke nulla.
4. Milyen függvényeket eredményez, ha az  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$  és  $\hat{L}^2$  operátorokkal az  $f(x) = 1; x; y; z; x^2; y^2; z^2; xy; yz$  és  $xz$  függvényekre hatunk? Mennyiben változik az eredmény, ha ezeket a függvényeket még beszorozzuk egy gömbszimmetrikus függvénnyel?

## 8. FEJEZET

### Mozgás centrális erőterben

Ebben a fejezetben egy részecske centrális erőterben való mozgásának a kvantummechanikai sajátosságait tanulmányozzuk. A tárgyalt probléma a hidrogénatom és a többelektronos atomok kvantummechanikai leírásához vezet el bennünket. Meghatározzuk a hidrogén-típusú (egyelektronnal rendelkező) atomok esetén a kvantummechanikai rendszer stacionárius állapotaiban a hullámfüggvényeket, az energia-sajátértékeket és az állapotokat jellemző kvantumszámok lehetséges értékeit, valamint ezek fizikai jelentését. Röviden, és matematikai bizonyítások nélkül tárgyaljuk a többelektronos atomok esetét is.

#### 8.1. A kéttest-probléma a klasszikus mechanikában

A centrális erőter azt jelenti, hogy a potenciális energia a tér adott pontjára nézve szimmetrikus. Ilyen erőterben a részecskére ható erő modulusza csak a részecskének középponttól mért távolságától függ. Legyen egy tehetetlenségi vonatkoztatási rendszerünk, melynek a középpontját választhatjuk úgy, hogy az origóban legyen. Ilyen esetben a centrális erőteret jellemző potenciális energia:

$$V(\vec{r}) = V(r); (r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}). \quad (8.1)$$

A centrális erőter nagyon gyakori a fizikában. Példaként megemlíthetjük egy nagy tömeg körül gravitáló kisebb tömegű testet, vagy egy nagy tömegű töltött részecske körül mozgó másik, kisebb tömegű töltés esetét. Ha ezen kéttest-problémákban az egyik test tömege sokkal nagyobb a másikénál, akkor megválasztható egy olyan tehetetlenségi rendszer, amelyben a nagyobb tömegű test gyakorlatilag nyugalomban van, és így jó megközelítéssel a kisebb tömegű test egy centrális erőterben mozog.

Tárgyaljuk először a klasszikus mechanika keretében a kéttest-problémát feltételezve, hogy a két kölcsönható részecske  $V$  potenciális energiája csak a részecskék közti  $r$  távolság nagyságától függ. A kéttest-probléma Hamilton-függvénye

$$H = T + V = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|), \quad (8.2)$$

ahol:

$$\vec{p}_1 = m_1 \dot{\vec{r}}_1; \quad \vec{p}_2 = m_2 \dot{\vec{r}}_2. \quad (8.3)$$

és  $\vec{r}_1$  illetve  $\vec{r}_2$  a két részecske helyzetvektora a választott tehetetlenségi rendszerben. A következőkben a rendszer mozgását felbontjuk a tömegközéppont mozgására, illetve a két test egymáshoz viszonyított relatív mozgására. Ennek érdekében  $\vec{r}_1$  illetve  $\vec{r}_2$  helyett bevezetünk új koordinátákat:

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}; \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2. \quad (8.4)$$

$\vec{R}$  a két részecskéből álló rendszer tömegközéppontjának a helyzetvektora,  $\vec{r}$  pedig a két részecske relatív helyzetét megadó helyzetvektor. Bevezetünk ugyanakkor két új tömeget is, amelyeknek segítségével a rendszer Hamilton-függvénye egyszerűbb alakban írható:

$$m_1 + m_2 = M; \quad m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \quad (8.5)$$

$M$  a rendszer össztömege,  $m$  pedig az úgynevezett *redukált* tömeg. Bevezetve a redukált tömeg impulzusát mint  $\vec{p} = m\dot{\vec{r}}$ , és a tömegközépponthoz tartozó impulzust,  $\vec{P} = M\dot{\vec{R}} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$ , az új koordinátákban a Hamilton-függvény:

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \rightarrow \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2m} + V(|\vec{r}|). \quad (8.6)$$

Összegezve, a következő változócseréket végeztük:  $\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2 \rightarrow \vec{R}, \vec{r}, \vec{P}, \vec{p}$ , és azt kaptuk, hogy az új változókban a rendszer Hamilton-függvénye egyszerűbben tanulmányozható:

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2m} + V(r). \quad (8.7)$$

A (8.7) Hamilton-függvény felbontható két független tag összegére,  $H = H_M + H_m$ , ahol  $H_M$  a tömegközéppont mozgását leíró Hamilton-függvény,  $H_m$  pedig a redukált tömeg mozgását leíró Hamilton-függvény. Azonnal észrevehető, hogy:  $\frac{\partial H}{\partial \vec{R}} = 0$ , ugyanis a Hamilton-függvény nem függ az  $\vec{R}$ -től

(a rendszerre nem hatnak külső erők). Ez azt jelenti, hogy a rendszerben van egy eltolási szimmetria ( $\vec{R}$  értékét tetszőlegesen változtathatjuk). A Nöether-tétel értelmében minden szimmetriához egy megmaradási törvény tartozik, jelen esetben a rendszer tömegközéppontjának a  $\vec{P}$  impulzusa marad meg:

$$\vec{P} = konst \quad (8.8)$$

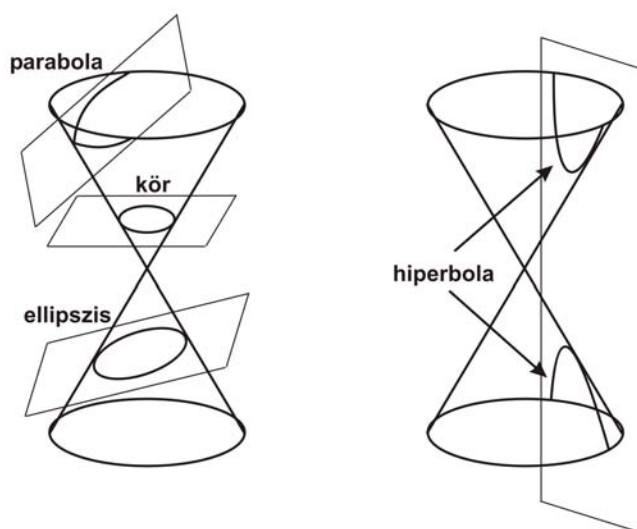
Ha a vonatkoztatási rendszer origóját a rendszer tömegközéppontjához kötjük, szintén tehetetlenségi vonatkoztatási rendszerünk lesz, és  $H_M = 0$ . Ebben az esetben a Hamilton-függvény leegyszerűsödik:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r). \quad (8.9)$$

Lényegében a redukált tömeg mozgását kell tehát tanulmányozni a  $V$  centrális erőternek megfelelő potenciálban. Ez a feladat azonban jól ismert a klasszikus mechanika, illetve az analitikus mechanika tárgyköréből. A gyakori,  $V(r) = k/r$  alakú centrális térben mozgó „redukált tömegű részecske” mozgásának a lehetséges pályái kúpszeletek (8.1 ábra). A részecske összenergiájának függvényében a pálya lehet ellipszis, parabola vagy hiperbola. Ha  $E < 0$  a pálya ellipszis (speciális esetben kör), ha  $E = 0$  a pálya parabola, és ha  $E > 0$  a pálya hiperbola lesz. Ha az egyik tömeg sokkal kisebb, mint a másik (bolygók Nap körüli mozgása, vagy a hidrogénatomban az elektron-proton rendszer), akkor tovább egyszerűsödik a feladat

$$m_1 \gg m_2 \rightarrow m \approx m_2, \quad M \approx m_1, \quad \vec{R} \approx \vec{r}_1, \quad (8.10)$$

a tömegközéppont gyakorlatilag a nagyobb tömegű test lesz, a redukált tömeg pedig a kisebb tömegű test tömege.



**8.1. ábra:** Kúpszeletek

A továbbiakban lássuk, hogyan tevődik fel a kvantummechanikában a kéttest-probléma, illetve ennek az egyszerűsített változata, a redukált tömeg centrális térben való mozgása. Melyek lesznek a rendszer lehetséges energiái, és melyek a stacionárius állapotokhoz tartozó hullámfüggvények?

## 8.2 A probléma kvantummechanikai megfogalmazása

A redukált tömeg mozgására a stacionárius Schrödinger-egyenlet azonnal adódik a (8.9) figyelembevételével, és az ismert operátor hozzárendelésekkel:

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \rightarrow \left( -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \right) \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}). \quad (8.11)$$

Mivel centrális potenciálunk van, a probléma legkönnyebben a térbeli polárkoordinátarendszerben (= gömbi koordinátarendszer) tanulmányozható. A  $\Delta$  Laplace-operátort tehát gömbi koordinátákban kell felírnunk, az  $x, y, z \rightarrow r, \theta, \phi$  változócsere alkalmazásával:

$$\begin{cases} x = r \sin(\theta) \cos(\phi) \\ y = r \sin(\theta) \sin(\phi) \\ z = r \cos(\theta) \end{cases} \quad (8.12)$$

A számítások elvégzése után (lásd az egyetemi matematikai analízis anyagot), azt kapjuk, hogy:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}. \quad (8.13)$$

Megjegyezzük, hogy a (8.13) alaknak van még egy ekvivalens és elterjedt felírási módja figyelembe véve, hogy:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\Psi). \quad (8.14)$$

Behelyettesítve a Laplace-operátor alakját, a (8.11) Schrödinger-egyenletünk a következőképpen alakul:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + V(r) \right) \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}). \quad (8.15)$$

A  $(\theta, \phi)$ -től függő részben azonnal felismerjük az  $\hat{L}^2$  operátor alakját, és írhatjuk, hogy

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{r^2 \hbar^2} \right) + V(r) \right) \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (8.16)$$

ahol:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right). \quad (8.17)$$

A Hamilton-operátorban az  $L^2$ -hez rendelt operátor tartalmazza az összes  $\theta, \phi$  függést. Azonnal belátható az is, hogy:

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0; [\hat{H}, \hat{L}^2] = 0; [\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0. \quad (8.18)$$

Ezek értelmében a  $H$ ,  $L^2$  és  $L_z$  mennyiségek kompatibilisek, és a hozzájuk rendelt operátoroknak van legalább egy közös sajátfüggvényrendszere. Az  $L^2$  és  $L_z$  mennyiségekhez rendelt operátorok közös sajátfüggvényeit a 7. fejezetben, az impulzusnyomaték-operátor kvantummechanikai tárgyalása során határoztuk meg. Láttuk, hogy ezek az  $Y_l^m(\theta, \phi)$  gömfüggvények

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi), \quad (8.19)$$

$$\hat{L}_z Y_l^m(\theta, \phi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \phi), \quad (8.20)$$

( $l = 0, 1, 2, \dots$ ) és egy adott  $l$  esetén  $m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l-2, l-1, l$ . Ismerve az  $\hat{L}^2$  sajátfüggvényeit, azonnal belátható, hogy a stacionárius megoldásokat a következő alakban kereshetjük:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = F(\theta, \phi) R(r), \quad (8.21)$$

ahol:

$$F(\theta, \phi) = Y_l^m(\theta, \phi). \quad (8.22)$$

Behelyettesítve ezt az alakot a (8.16) egyenletbe, az  $R(r)$ -re egy másodrendű differenciálegyenlet adódik, amit *radiális Schrödinger-egyenletnek* nevezünk.

### 8.3 A radiális Schrödinger-egyenlet

A Schrödinger-egyenlet (8.16) alakját felhasználva, és a megoldást a (8.21–8.22) alakban keresve a következő egyenletek adódnak:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{r^2 \hbar^2} \right) + V(r) \right) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}), \quad (8.23)$$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{r^2 \hbar^2} \right) + V(r) \right) R(r) Y_l^m(\theta, \phi) = E R(r) Y_l^m(\theta, \phi), \quad (8.24)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) + V(r) R(r) = E R(r), \quad (8.25)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) + V(r) R(r) = E R(r), \quad (8.26)$$

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0. \quad (8.27)$$

A (8.27) egyenletet *radiális Schrödinger-egyenletnek* nevezzük. Az egyenletbe  $l$  értéke tetszőleges természetes szám lehet. Az egyenletet átírhatjuk számunkra kedvezőbb alakba az

$$R(r) = \frac{1}{r} y_l(r), \quad (8.28)$$

transzformációt használva. A számítások a következőképpen alakulnak:

$$\frac{d}{dr} R(r) = -\frac{1}{r^2} y_l(r) + \frac{1}{r} \frac{dy_l(r)}{dr}, \quad (8.29)$$

$$\frac{d^2}{dr^2} R(r) = \frac{2}{r^3} y_l(r) - \frac{1}{r^2} \frac{dy_l(r)}{dr} - \frac{1}{r^2} \frac{dy_l(r)}{dr} + \frac{1}{r} \frac{d^2 y_l(r)}{dr^2}, \quad (8.30)$$

$$\begin{aligned} \frac{2}{r} \frac{d}{dr} R(r) + \frac{d^2}{dr^2} R(r) &= -\frac{2}{r^3} y_l(r) + \frac{2}{r^2} \frac{dy_l(r)}{dr} + \frac{2}{r^3} y_l(r) - \frac{1}{r^2} \frac{dy_l(r)}{dr} - \frac{1}{r^2} \frac{dy_l(r)}{dr} + \frac{1}{r} \frac{d^2 y_l(r)}{dr^2} = \\ &= \frac{1}{r} \frac{d^2 y_l(r)}{dr^2}, \end{aligned}$$

és  $y_l$ -re kapjuk, hogy:

$$\frac{d^2 y_l(r)}{dr^2} + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] y_l(r) = 0. \quad (8.31)$$

Bevezetve a

$$V_l(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}, \quad (8.32)$$

*centrifugális* potenciált ( $l = 0, 1, 2, \dots$ ) és a

$$V_{eff}(r) = V(r) + V_l(r), \quad (8.33)$$

*effektív potenciált*, a radiális Schrödinger-egyenlet:

$$\frac{d^2 y_l(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_{eff}(r)) y_l(r) = 0. \quad (8.34)$$

A (8.34) alakban felírt stacionárius Schrödinger-egyenlet hasonló az egydimenziós rendszerek esetén felírt Schrödinger-egyenlettel, azzal a megjegyzéssel, hogy a potenciális energia helyett az effektív potenciális energia szerepel (a valódi centrális és centrifugális potenciális energiák összege). Lényeges különbség az egydimenziós mozgásokra felírt feladathoz képest az, hogy a jelen esetben az  $r$  koordináta csak pozitív értékekre van értelmezve. Az egydimenziós esetben általánosan kijelentett törvényszerűségek azonban igazak maradnak.

Ha a  $V_{eff}$  effektív potenciálban kötött állapotokat tekintünk, az ezekhez tartozó energiaspektrum diszkrét kell hogy legyen. Az energia-sajátértékekhez tartozó sajátfüggvények nem elfajultak, vagyis az  $R(r)$  radiális hullámfüggvény jól meghatározott minden sajátállapotban. (Ezen utóbbi kijelentés igaz marad a nem kötött állapotokra is, ugyanis a mozgás, amint már megjegyeztük, a tengelyünk egyik irányában véges.) A hullámfüggvény  $(\theta, \phi)$ -től függő része jól meghatározott az  $l$  és  $m$  kvantumszámok által. Ezek alapján a centrális térben való mozgás esetén a részecske hullámfüggvénye jól meghatározott az

$E$ ,  $l$  és  $m$  értékei szerint, vagyis  $E$ ,  $L^2$ , és  $L_z$  egy teljes megfigyelhető mennyiségrendszer alkot. Általános esetben az  $E$  lehetséges értékei függhetnek az  $l$  *mellékkvantumszám* értékétől is. Mivel a (8.27) radiális egyenlet nem tartalmazza az  $m$  mágneses kvantumszámot ( $m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l-2, l-1, l$ ), bármely adott  $E$  és  $l$  értékhez legalább  $(2l+1)$  különböző sajátfüggvény tartozhat. Egy adott  $(E, l)$  energiaszint tehát legalább  $(2l+1)$ -szeresen elfajult.

Az  $y_l(r)$  radiális függvény zérus pontjainak a számát a  $0 < r < \infty$  intervallumon *radiális kvantumszámnak* ( $n_r$ ) nevezzük. Az alapállapotban  $n_r = 0$ .

Azonnal megvizsgálható az  $y_l(r)$  radiális függvény viselkedése az  $r = 0$  pont környezetében, ha a centrális potenciális energiára feltételezzük, hogy  $\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) = 0$ . (Ez a feltétel a számunkra lényeges  $1/r$  típusú potenciálok esetén igaz lesz.) Ilyen feltételek mellett a (8.31) egyenletben az  $r \rightarrow 0$  határesetben elhanyagolhatók az  $E$ -t és  $V$ -t tartalmazó tagok, és a radiális egyenletünk egyszerű lesz:

$$r^2 \frac{d^2}{dr^2} y_{l0} - l(l+1)y_{l0} = 0 \quad (r \rightarrow 0). \quad (8.35)$$

Azonnal belátható, hogy a fenti egyenlet megoldását hatványfüggvény alakban kereshetjük. Mivel az  $r \rightarrow 0$  határértéket vizsgáljuk, a legkisebb kitevőjű tag határozza meg a viselkedést az  $r = 0$  pont környezetében. Legyen a legkisebb kitevőjű tag  $r^s$  alakú ( $s > 1$ ). A (8.35) szerint azonnal adódik, hogy:

$$s(s-1) - l(l+1) = 0 \rightarrow s = l+1 \text{ vagy } s = -l. \quad (8.36)$$

Ezek alapján az  $r = 0$  pont közelében a lehetséges megoldás  $y_{l0} = r^{l+1}$  vagy  $y_{l0} = r^{-l}$  alakú. A második megoldás nem fogadható el, hiszen végtelenné válik az  $r \rightarrow 0$  határértékben. A hullámfüggvény  $r$ -től függő része tehát az  $r \rightarrow 0$  határesetben:

$$R_0(r) = \frac{1}{r} \cdot y_{l0}(r) = r^l. \quad (8.37)$$

A centrális térben mozgó részecske esetén annak a valószínűség-sűrűsége, hogy a részecske a centrális tér középpontjának a környezetében található:

$$\rho = |\Psi_{Elm}(r, \theta, \phi)|^2 \sim r^{2l} |Y_l^m(\theta, \phi)|^2. \quad (8.38)$$

Látható, hogy az  $r \rightarrow 0$  határesetben ez a valószínűség-sűrűség annál gyorsabban csökken a nullához, minél nagyobb  $l$  értéke. Ez a tény a centrifugális potenciális energia (8.32)  $l$ -függésének tulajdonítható.

## 8.4 A Coulomb típusú potenciál. Az egyelektronos atomok

A centrális potenciáloknek a legfontosabb esete a Coulomb típusú potenciál. Akár gravitációs, akár elektrosztatikus kölcsönhatásokat vizsgálunk, ilyen alakú potenciális energia jelenik meg. Egy speciális feladat, amely a kvantummechanikában különös jelentőséggel bír, az  $e$  töltésű elektron mozgása az  $eZ$  töltésű mag körül:

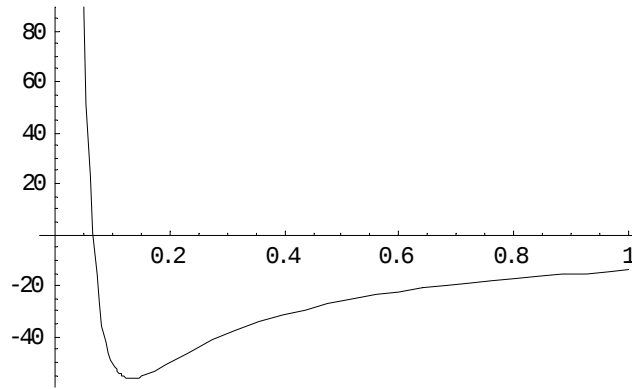
$$V(r) = -\frac{e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e_0}{r}; \quad e_0 = \frac{e^2 Z}{4\pi\epsilon_0}. \quad (8.39)$$

Ahogy azt már láttuk, ez a kéttest-probléma visszavezethető a redukált tömegnek a

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{e_0}{r} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}, \quad (8.40)$$

effektív centrális potenciálban való egydimenziós mozgására. A megoldandó radiális Schrödinger-egyenlet tehát:

$$\frac{d^2 y_l(r)}{dr^2} + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{e_0}{r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] y_l(r) = 0. \quad (8.41)$$



8.2. ábra: A (8.40) effektív potenciál  $l \neq 0$  esetén

Mivel a számunkra érdekes atomi rendszerekben az elektron tömege jóval kisebb a nukleon tömegénél, a redukált tömeg jó közelítéssel az elektron tömege lesz.

Ahogy ezt az egydimenziós mozgások általános tárgyalásánál megtanultuk, ha  $E < 0$ , akkor a várt energiaspektrum diszkrét, az  $E > 0$  esetben pedig folytonos.

Azonnal észrevehető, hogy a  $\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) \rightarrow 0$  feltétel teljesül, így az  $r \rightarrow 0$

határesetben a megoldás  $y_l(r) = r^{l+1}$  alakú.

Az  $r \rightarrow \infty$  határesetben a (8.41) stacionárius Schrödinger-egyenlet:

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \right) y_l(r) = 0 \Rightarrow \frac{d^2 y_l(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E y_l(r) = 0. \quad (8.42)$$

Ha  $E > 0$ , a rendszerünk nincs kötött állapotban, és a megoldás az  $r \rightarrow \infty$  határesetben:

$$y_l(r) = A e^{ikr} + B e^{-ikr}. \quad (8.43)$$

Az  $E > 0$  eset főleg ütközéseknél érdekes.

Ha  $E < 0$ , kötött állapotaink vannak. A

$$\frac{2m}{\hbar^2} E = -q^2 \quad (8.44)$$

jelöléssel az  $r \rightarrow \infty$  határesetben az általános megoldás:

$$y_l(r) = A e^{-qr} + B e^{qr}. \quad (8.45)$$

Azonnal belátható, hogy a végtelenben az elfogadható (nem divergáló) megoldás:

$$y_l(r) = c e^{-qr}. \quad (8.46)$$

A következőkben a hidrogén-típusú atomok kötött állapotait fogjuk vizsgálni. A (8.41) radiális egyenlet megoldását olyan alakban keressük, amely visszaadja mindkét eddig vizsgált ( $r \rightarrow 0$  és  $r \rightarrow \infty$ ) határesetet:

$$y_l(r) = c r^{l+1} e^{-qr} u_l(r). \quad (8.47)$$

A fenti képletben  $u_l$  egy véges fokú polinomiális függvény:

$$u_l(r) = \sum_{k=0}^n a_k r^k. \quad (8.48)$$

A  $\left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e_0}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) y_l(r) = 0$  radiális egyenletben az  $x=2qr$  változócsere alkalmazzuk:

$$\left( 4q^2 \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{2qe_0}{x} - 4q^2 \frac{l(l+1)}{x^2} \right) y_l(x) = 0, \quad (8.49)$$

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{4q^2 \hbar^2} E + \frac{me_0}{q \hbar^2} \frac{1}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right) y_l(x) = 0, \text{ de } q^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} \text{ és így: } (8.50)$$

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{4} + \frac{\nu}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right) y_l(x) = 0 \text{ ahol } \nu = \frac{me_0}{q \hbar^2}. \quad (8.51)$$

Behelyettesítve az  $y_l$  feltételezett

$$y_l(r) = c' x^{l+1} e^{-\frac{1}{2}x} u_l(x), \quad u_l(x) = \sum_{k=0}^n a_k x^k \quad (8.52)$$

alakját:

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{4} + \frac{\nu}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right) c' x^{l+1} e^{-\frac{1}{2}x} u_l(x) = 0 \quad (8.53)$$

A műveletek elvégzése után  $u_l$ -re vonatkozóan a következő egyenlethez jutunk:

$$\left( x \frac{d^2}{dx^2} + (2l+2-x) \frac{d}{dx} - (l+1-\nu) \right) u_l(x) = 0, \\ \left( x \frac{d^2}{dx^2} + (2l+2-x) \frac{d}{dx} - (l+1-\nu) \right) \sum_{k=0}^n a_k x^k = 0. \quad (8.54)$$

A következőkben ugyanúgy járunk el, mint a harmonikus oszcillátor esetében. Kiszámítjuk a polinomfüggvény deriváltjait

$$\frac{d}{dx} \sum_{k=0}^n a_k x^k = \sum_{k=0}^n k a_k x^{k-1}, \quad \frac{d^2}{dx^2} \sum_{k=0}^n a_k x^k = \sum_{k=0}^n k(k-1) a_k x^{k-2}, \quad (8.55)$$

és visszahelyettesítjük ezt a (8.54) egyenletbe:

$$\sum_{k=0}^n a_k k(k-1) x^{k-1} + (2l+2) \sum_{k=0}^n a_k k x^{k-1} - \sum_{k=0}^n a_k k x^k - (l+1-\nu) \sum_{k=0}^n a_k x^k = 0. \quad (8.56)$$

A fenti összegben az azonos hatványú tagokat összevonjuk:

$$a_n (\nu - l - 1 - n) x^n + \sum_{t=0}^{n-1} [a_{t+1} t(t+1) + (2l+2) a_{t+1} (t+1) - a_t t - (l+1-\nu) a_t] x^t = 0 \quad (8.57)$$

Annak a feltétele, hogy a fenti egyenlőség igaz legyen az, hogy minden hatványú tag együtthatója nulla legyen:

$$a_{t+1} (t+1)(t+2l+2) - a_t (t+l+1-\nu) = 0; \\ a_n (\nu - l - 1 - n) = 0. \quad (8.58)$$

Ha  $n$ -ed fokú polinom megoldást keresünk, akkor  $a_n \neq 0$ , és mivel  $l \in \mathbb{Z}$ , azonnal következik, hogy:

$$\nu = n + l + 1 \in \mathbb{Z}. \quad (8.59)$$

Az  $n = 0, 1, 2, \dots$  természetes számot, ami megadja a polinom fokát, radiális kvantumszámnak, a  $\nu$  értékét pedig főkvantumszámnak nevezzük. Mivel  $E < 0$  megoldásokat keresünk, (8.50) és (8.51) alapján azonnal következik, hogy  $\nu \geq 0$ . Belátható az is, hogy a  $\nu = 0$  megoldás nem fogadható el, ugyanis ez  $E = -\infty$  kötési energiát eredményezne, ami azzal lenne ekvivalens, hogy az elektron az atommagban található. A  $\nu$  főkvantumszámra azt kapjuk tehát, hogy:

$$\nu = 1, 2, 3, \dots \in \mathbb{Z}^* \quad (8.60)$$

A (8.50) és (8.51) felhasználásával megkaphatók az energia lehetséges sajátértékei:

$$\nu^2 = -\frac{mZ^2e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2E} \rightarrow E = -\frac{1}{\nu^2} \frac{mZ^2e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} = -\frac{Z^2R}{\nu^2}, \quad (8.61)$$

ahol:

$$R = \frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} \text{ a Rydberg-állandó.} \quad (8.62)$$

Látható, hogy a vizsgált kvantummechanikai rendszerre az energiaspektrum diszkrét, és a lehetséges energia-sajátértékeket a  $\nu$  főkvantumszám határozza meg. Az is azonnal észrevehető, hogy az energia-sajátértékekre ugyanazon értékeket kaptuk mint az egyszerű Bohr-modell esetén.

Adott  $\nu$  és  $l$  kvantumszámokhoz tartozó sajátfüggvényeket az  $u_l$   $n$ -ed fokú polinomok ( $n = \nu - l - 1$ ) határozzák meg. Az  $u_l$  polinomok együtthatójára (8.58) szerint a következő rekurzív összefüggés adódik:

$$a_{t+1} = a_t \frac{t + l + 1 - \nu}{(t + 1)(t + 2l + 2)}. \quad (8.63)$$

Az  $a_0$  tetszőleges értékéből kiindulva (általában  $a_0 = 1$ ), ezek alapján megszerkeszthető az  $a_1, \dots, a_n \neq 0$  sorozat. Az így kapott  $n$ -ed fokú  $u_l$  polinomokat asszociált Laguerre-polinomoknak nevezzük és  $L_n^{2l+1}(x)$ -el jelöljük.

A sajátfüggvényeket tehát három kvantumszám segítségével adhatjuk meg. A  $\nu$  főkvantumszám, és az  $l$  mellékvantumszám meghatározza a hullámfüggvény  $R_l$  radiális részét:

$$R_l(r) = \frac{y_l(r)}{r} = cr^l e^{-qr} u_l(2qr) = c'(2qr)^l e^{-qr} L_{\nu-l-1}^{2l+1}(2qr). \quad (8.64)$$

A  $\nu$  főkvantumszám tetszőleges pozitív egész szám lehet ( $\nu = 1, 2, 3, \dots$ ), míg az  $l$  mellékvantumszám (8.59) értelmében  $l = 0, 1, 2 \dots \nu - 1$  értékeket vehet fel. Az  $l$  mellékvantumszám részben meghatározza a hullámfüggvény  $(\theta, \phi)$ -től függő részét. A hullámfüggvény teljes  $(\theta, \phi)$ -től való függésének a meghatározásához (az  $Y_l^w(\theta, \phi)$  gömbfüggvények ismeretéhez) szükségünk van még egy harmadik  $w = -l, -l+1, \dots, l-1, l$  kvantumszámra is, amit mágneses kvantumszámnak nevezünk (ezt a kvantumszámot általában  $m$ -el jelölik, mi itt azért jelöltük nem konvencionálisan  $w$ -vel, mert az elektron tömegét jelöltük  $m$ -el). A teljes hullámfüggvény alakja tehát:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = c(2qr)^l e^{-qr} L_{\nu-l-1}^{2l+1}(2qr) Y_l^w(\theta, \phi), \quad (8.65)$$

ahol  $c$  egy normálási konstans. Tehát a stacionárius állapotokban a lehetséges hullámfüggvényeket három  $(\nu, l, w)$  kvantumszám határozza meg.

Az atomfizikában a kvantumszámokat egyezményesen más betűkkel jelölik. Ezeket a jelöléseket eddig nem vezettük be, nehogy más használt fizikai mennyiségek jelöléseivel összetévevesszük. A következőkben azonban ezen egyezményes jelölésekre fogunk áttérni:

- $n$  főkvantumszám ( $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ )
- $n_r$  radiális kvantumszám ( $n_r = n - l - 1 = 0, 1, 2, \dots$ )
- $l$  mellékkvantumszám ( $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ )
- $m$  mágneses kvantumszám ( $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ )

Az egyelektronos atomok esetén azt kapjuk tehát, hogy az energia-sajátértékek csak az  $n$  főkvantumszám értékétől függenek. Egy adott  $n$  főkvantumszám esetén az  $l$  mellékkvantumszám, ami az impulzusnyomaték modulusát jellemzi, az  $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$  értékeket veheti fel. Adott  $l$  esetén az  $m$  mágneses kvantumszám (ami az impulzusnyomaték  $z$  tengely irányú komponensét jellemzi) az  $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$  értékeket veheti fel. Az  $n$  és  $l$  kvantumszámok meghatározzák az  $n_r$  radiális kvantumszám értékét, amely megadja a hullámfüggvény radiális részére a csomópontok (zérus-helyek) számát. Azonnal belátható, hogy adott  $n$  főkvantumszámhoz tartozó energia-sajátérték elfajulási foka:

$$g(n) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \quad (8.66)$$

Amint azt már említettük, a klasszikus nemrelativisztikus kvantummechanika keretében a centrális térben való mozgás esetén az  $E$ ,  $L^2$  és  $L_z$  mennyiségek egy teljes megfigyelhető rendszert alkotnak. Rendre megmérve ezen fizikai mennyiségeket, megkapjuk az  $n$ ,  $l$ , és  $m$  kvantumszámokat, és ezennel meghatározhatjuk a kvantummechanikai rendszer állapotát.  $E$  értékét az  $n$  főkvantumszám határozza meg,  $L^2$  értékét az  $l$  mellékkvantumszám,  $L_z$  értékét pedig az  $m$  mágneses kvantumszám:

$$\begin{cases} E = -\frac{Z^2 R}{n^2} \rightarrow n = 1, 2, 3, \dots \\ L^2 = \hbar^2 l(l+1) \rightarrow l = 0, 1, 2, \dots \\ L_z = \hbar m \rightarrow m = -l, \dots, 0, \dots, l \end{cases} \quad (8.67)$$

Az atomfizikában az elektron lehetséges állapotait a főkvantumszám és a mellékkvantumszám segítségével kódoljuk. Az  $l = 0$  állapotokat  $s$  állapotoknak nevezzük, az  $l = 1$  állapotokat  $p$  állapotoknak nevezzük, az  $l = 2$  állapotok  $d$  állapotok, míg az  $l=3$  állapotok  $f$  állapotok lesznek. A fenti tárgyalásmód értelmében az egyelektronos atomok esetén az energia csak a

főkvantumszámtól függ, és ilyen esetben a különböző  $(n,l)$  állapotok energiáit és az elfajulási fokát, illetve a g össz-elfajulási fokot a 8.3 ábra szemlélteti.

|              |              |              |     |
|--------------|--------------|--------------|-----|
| E            |              |              |     |
| <u>3s(1)</u> | <u>3p(3)</u> | <u>3d(5)</u> | g=9 |
| <u>2s(1)</u> | <u>2p(3)</u> |              | g=4 |
| <u>1s(1)</u> |              |              | g=1 |

**8.3. ábra:** Egyelektronos atom  $(n,l)$  energiaszintjei és az elfajulási fokok

Az elektron összhullámfüggvényére a normálási feltétel:

$$\iiint \Psi^*(r, \theta, \phi) \Psi(r, \theta, \phi) d^3x = 1 \rightarrow \iiint \Psi^*(r, \theta, \phi) \Psi(r, \theta, \phi) r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi = 1, \quad (8.68)$$

ami által meghatározható a (8.65) egyenletben a  $c$  normálási konstans.

Néhány kis  $n$ ,  $l$ , és  $m$  értékekhez tartozó normált  $\Psi_{n,l,m}$  hullámfüggvény:

$$\Psi_{100}(r, \theta, \phi) = (\pi a^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a}}; \quad (8.69)$$

$$\Psi_{200}(r, \theta, \phi) = (32\pi a^3)^{-\frac{1}{2}} \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-\frac{r}{2a}}; \quad (8.70)$$

$$\Psi_{211}(r, \theta, \phi) = (64\pi a^3)^{-\frac{1}{2}} \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{2a}} \sin \theta e^{i\phi}; \quad (8.71)$$

$$\Psi_{21-1}(r, \theta, \phi) = (64\pi a^3)^{-\frac{1}{2}} \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{2a}} \sin \theta e^{-i\phi}; \quad (8.72)$$

$$\Psi_{210}(r, \theta, \phi) = (32\pi a^3)^{-\frac{1}{2}} \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{2a}} \cos \theta. \quad (8.73)$$

A fenti képletekben

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e Z e^2}, \quad (8.74)$$

az első Bohr-pálya klasszikus sugara.

A nemrelativisztikus kvantummechanikából a részecskék (elektronok) spin szabadsági fokai nem következnek. A spin a relativisztikus tárgyalásmód során jelenik meg, ezért a klasszikus nemrelativisztikus kvantummechanikában a

spint erőltetve kell bevezetni. Az elektronnak egy  $s = 1/2$  kvantumszámmal jellemzett spin szabadsági foka is van, amely a tengelykörüli perdületéhez rendelt impulzusnyomatékának a moduluszát határozza meg  $L_s^2 = \hbar^2 \frac{1}{2} (1 + \frac{1}{2})$ .

Ezen perdülethez rendelt impulzusnyomatéknak egy kiválasztott tengely irányú komponensét az  $m_s = 1/2$ , illetve  $m_s = -1/2$  lehetséges mágneses spinquantumszámok jellemzik. A spin szabadsági fok tehát minden eddig kapott kvantummechanikai állapotnak további kétszeres elfajulását adja. Az  $n$  főkvantumszámmal jellemzett kvantummechanikai állapot tehát a valóságban  $g(n)=2n^2$ -szeresen elfajult.

## 8.5 A többelektronos atomok

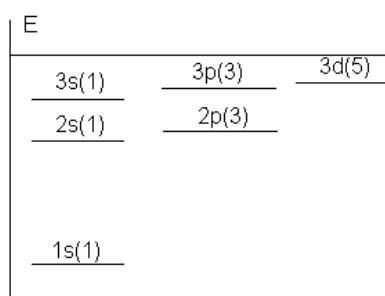
Mindeddig csak az egyelektronos atomok esetét tárgyaltuk. Ha többelektronos atomot akarunk tárgyalni, akkor az már sajnos nem „egyszerű” kéttest-probléma, és a feladatnak már a klasszikus mechanikai tárgyalása is nagyon bonyolulttá válik. Többelektronos atomoknál lényeges figyelembe venni az elektronok között ható taszítóerőket, amelyeknek következtében az elektronok mag körüli mozgása nem lesz egymástól független. A feladat kvantummechanikailag egzaktul nem oldható meg, és általában közelítő módszereket alkalmazunk.

Első közelítésben teljesen elhanyagoljuk az elektronok közti kölcsönhatásokat, de figyelembe vesszük az elektronokra érvényes *Pauli-féle kizárási elvet*. Ha nem kölcsönható részecskékből álló kvantummechanikai rendszerünk van, akkor ebben a rendszerben először is értelmezzük az *egyrészecske-állapotokat*. Az egyrészecske-állapotokat úgy kapjuk, hogy megkeressük a rendszer stacionárius állapotait (energia-sajátállapotait), feltételezve, hogy a rendszerben egyetlen egy részecske van. A nem kölcsönható több részecskékből álló rendszer lehetséges állapotait a részecskéknél az egyrészecske-állapotokra vett elosztási lehetőségei adják meg. A Pauli-féle kizárási elv a feles spinquantumszámmal rendelkező részecskékre (így az elektronokra is) vonatkozik. **Ezen elv értelmében a nem kölcsönható, feles spinquantumszámmal rendelkező azonos részecskékből álló rendszerben két részecske nem található ugyanabban az egyrészecske-állapotban.** A Pauli-féle kizárási elv tehát nagymértékben lecsökkenti a több részecske rendszerben az egyrészecske-állapotokon való lehetséges elosztásokat. Mivel adott egyrészecske-állapotot az őt leíró hullámfüggvénnyel, ezt pedig a hozzá tartozó kvantumszámokkal jellemezhetjük, a Pauli-féle kizárási elvet kijelenthetjük a kvantumszámokkal is. **Egy nem kölcsönható, feles spinű azonos részecskékből álló kvantummechanikai rendszerben két részecske**

**nem lehet ugyanazon kvantumszámokkal jellemzett egyrészecske-állapotban.**

Figyelembe véve a Pauli-féle kizárási elvet és a fizikában általánosan érvényes energiaminimum elvét, első megközelítésben azonnal tárgyalható a többelektronos atomok alapállapota is. Ha  $N$  elektronunk van az atomban, akkor a köztük levő kölcsönhatás elhanyagolásával a lehetséges egyrészecske-állapotokat a (8.65) hullámfüggvények jellemzik. Az állapotokat az  $(n, l, m, m_s)$  kvantumszámokkal jellemezhetjük, és ezen állapotok energiája csak az  $n$  főkvantumszám értékétől függ (8.3 ábra). Az  $N$  darab elektront úgy kell tehát elosztanunk a lehetséges állapotokon, hogy két elektronnak ne legyen ugyanaz mind a négy kvantumszáma, és hogy a rendszer összenergiája a lehető legkisebb legyen. Ha  $N=2$ , akkor héliumatomunk van, és azonnal következik, hogy mindkét elektront az  $1s$  állapotba kell tenni.  $N = 3$  esetén (lítiumatom) az alapállapotban két elektron az  $1s$  egyrészecske-állapotba kerül, egy elektron pedig a  $2s$  vagy  $2p$  állapotba fog kerülni. A  $N>3$ , többelektront tartalmazó atomok alapállapotaiban az elektronok konfigurációja hasonlóan kapható meg.

A valóságban azonban az elektronok közti kölcsönhatások nem hanyagolhatók el. Jobb megközelítést kapunk, ha az elektronok közti kölcsönhatást gyengének tekintjük, és az egyrészecske-állapotok perturbációjaként kezeljük. A perturbáció következtében az egyrészecske-állapotok energianívói eltolódnak, és az energiaállapotok elfajulása részben feloldódik. A perturbációs módszert ezen könyv keretében nem fogjuk tárgyalni, és itt csak a lényeges eredményeket ismertetjük. A legfontosabb következmény az lesz, hogy az egyrészecske-állapotok energiái nemcsak az  $n$  főkvantumszám értékétől, hanem az  $l$  mellékkvantumszám értékétől is függni fognak. Nagyobb  $l$  mellékkvantumszámhoz nagyobb energiaérték fog tartozni, úgy, ahogy ezt a 8.4. ábrán szemléltetjük. Adott energia-sajátérték elfajulási szintje ezáltal részben feloldódik. Egy  $(n, l)$  kvantumszám-párhoz tartozó energia-sajátérték a mágneses tér hiányában  $2(2l+1)$ -szeresen elfajult.



**8.4. ábra:** Többelektronos atom egyrészecske-állapottai

A többelektronos atom alapállapotát a 8.4. ábrán látható szintek betöltésével kapjuk, figyelembe véve az elektronokra érvényes Pauli-féle kizárási elvet és az energiaminimum elvét. Legelőször az  $1s$  szintek telnek meg elektronokkal, majd a  $2s$ ,  $2p$ ,  $3s$ ,  $3p$ ...stb szintek. A perturbált  $(n,l)$  szintekhez tartozó energiaértékek elég komplex eloszlásúak, és nagy  $n$ , illetve  $l$  értékekre előfordul például, hogy az alacsonyabb  $n$  értékhez, de nagyobb  $l$ -hez tartozó szint energiája nagyobb lesz, mint egy nagyobb  $n$  értékhez tartozó szintté.

## 8.6 A Bohr-pálya kvantummechanikai értelmezése

A kvantummechanika keretében nem beszélhetünk klasszikus értelemben vett pályákról és pályasugarakról. A (8.65) hullámfüggvények értelmében nem zérus valószínűsége van annak, hogy az elektron akárhol legyen a mag körül. Léteznek azonban bizonyos kitüntetett irányok (ahogy a gömbfüggvények tárgyalásánál láttuk), és bizonyos magkörüli távolságok (amelyek a hullámfüggvény radiális részének az ábrázolásából kaphatók meg), amelyekre a részecske megtalálhatósági valószínűség-sűrűsége maximális. Ezek alapján többféle lehetőség adódik az elektronpályák értelmezésére. Definiálhatjuk a pályasugarat például valószínűségi alapon, megkeresve a radiális tartózkodási valószínűség-sűrűség maximumát, vagy definiálhatjuk az átlagértékek segítségével, kiszámítva az adott kvantummechanikai állapotra az  $\langle r \rangle_\psi$  mennyiséget.

Tekintsük példaként az elektron alapállapotát a hidrogénatomban. Az alapállapot egy  $1s$  típusú kvantummechanikai állapot, amelyhez gömbszimmetrikus hullámfüggvény tartozik:

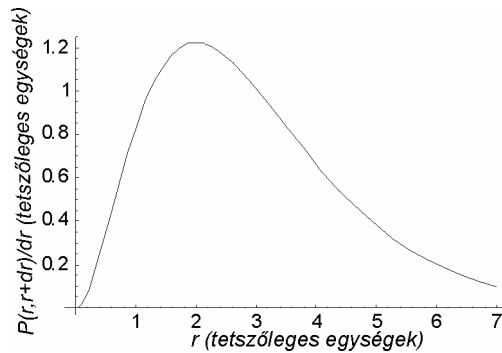
$$\Psi_{100}(r, \theta, \phi) = \left(\pi a^3\right)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a}}. \quad (8.75)$$

$\Psi_{100}$  egy exponenciálisan lecsengő függvény, amelynek a maximuma a nullában van.

1) Először értelmezzük erre az állapotra a Bohr-sugarat valószínűségi alapon. Mivel gömbszimmetrikus hullámfüggvényünk van, annak a  $P(r, r+dr)$  valószínűsége, hogy az elektron  $r$  és  $r+dr$  távolságok között legyen a magtól:

$$P(r, r+dr) = |\Psi_{100}(r, \theta, \phi)|^2 4\pi r^2 dr. \quad (8.76)$$

$P(r, r+dr)/dr$  egy harang alakú görbe, amelynek a maximumpontja értelmezi a Bohr-pálya sugarát (lásd 8.5 ábra).



**8.5. ábra:** *A magtól  $r$  távolságra való megtalálhatósági valószínűség-sűrűségnek az alakja az alapállapotban*

Az első Bohr-pálya sugarára azonnal adódik:

$$\frac{d}{dr}(r^2 e^{-\frac{2r}{a}}) = 0 \Rightarrow r_{Bohr} = a. \quad (8.77)$$

2) A Bohr-pálya sugara értelmezhető az  $\langle r \rangle$  átagérték kiszámításával is. Ezen értelmezés alapján:

$$r_{Bohr} = \langle r \rangle_\Psi = \iiint r |\Psi_{100}(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta (d\theta)(d\phi)(dr). \quad (8.78)$$

A számítások elvégzése azonnali:

$$\langle r \rangle_{100} = \frac{4\pi}{\pi a^3} \int_0^\infty r^3 e^{-\frac{2r}{a}} dr = \frac{3}{2} a. \quad (8.79)$$

Látható, hogy a valószínűségi, illetve átagértékekkel értelmezett Bohr-pálya sugarak nagyságrendileg megegyeznek, és jól egyeznek a Bohr-féle atommodell által szolgáltatott értékkel.

Megjegyezzük, hogy a  $\Psi_{nlm}$  hullámfüggvények segítségével hasonló módon kiszámítható az elektronnak bármely térintervallumban való tartózkodási valószínűsége, illetve bármely számunkra lényeges átagérték is.

## 8.7 Javasolt feladatok

1. Tanulmányozzuk egy kvantummechanikai részecske stacionárius állapotait a

$V(r) = \frac{A}{r^2} + Br^2$  típusú centrális térben ( $A$  és  $B$  pozitív konstansok).

2. A hidrogénatom  $n = 2$ ,  $l = 0$  és  $m = 0$  kvantumszámokkal jellemzett állapotában becsüljük meg a pályasugár értékét.

3. Számítsuk ki az  $r$  és  $1/r$  várható értékét a hidrogénatom tetszőleges  $n, l, m$  kvantumszámokkal jellemzett stacionárius állapotaiban.
4. Igazoljuk, hogy a hidrogénatom  $2p$  stacionárius állapotaiban a szögek szerint átlagolt valószínűség-sűrűség:  $r^2\Psi^2(r)$  maximuma az  $r = \frac{4\hbar^2}{me^2}$  helyen van ( $m$  az elektron tömege,  $e$  a töltésének a modulusza).

# Függelék

## I. Függelék

### A valószínűség-számítás alapjai

Ezen függelék keretében röviden tárgyaljuk a valószínűség-számítás alapjait, melyeket a kvantummechanika tárgyalása során felhasználunk. Bevezetjük a diszkrét és folytonos valószínűségi változókat, ezeknek az eloszlásfüggvényét, a lényeges és gyakran előforduló eloszlásokat, illetve a valószínűségi változókat jellemző mennyiségeket.

#### I.1 Alapfogalmak

*Véletlen jelenség:* létrejöttét befolyásoló összes tényezőt nem ismerjük, ezért számunkra véletlenszerűnek tűnik. Azonnali példa egy játékkockával való dobás.

*Tömegjelenség:* a jelenség adott feltételek mellett akárhányszor megismételhető.

A valószínűség-számítás keretében **véletlen tömegjelenségekkel** foglalkozunk. Ilyen például a kockadobás eredménye, radioaktív próbában bekövetkező bomlások között eltelt idő, stb.

*Elemi esemény:* egy adott kísérlet lehetséges kimenetelei ( $\omega$ ). Ezen lehetséges kimenetek értékét **valószínűségi változónak** nevezzük.

*Eseménnytér:* adott kísérlet összes lehetséges kimeneteleinek halmaza ( $\Omega$ ).

*Esemény:* a kísérlettel kapcsolatban megfogalmazható bármely jelenség, az eseménytér valamely részhalmaza (latin nagybetűvel jelöljük).

*Biztos esemény:* olyan esemény, amely a kísérlet során mindig bekövetkezik.

*Lehetetlen esemény:* olyan esemény, amely a kísérlet során soha nem következik be.

#### A valószínűség fogalma:

Ha egy kísérlet  $A$  kimenetelének valószínűsége  $p$ , akkor, ha a kísérletet nagyon sokszor elvégezzük, azt várjuk, hogy a kimenetek  $p$  hányadában az  $A$  kimenetel valósul meg. Ez a valószínűség **gyakorissággal** (frekvenciával) megadott értelmezése.

## I.2 Valószínűségi változó. Eloszlásfüggvény

### Diszkrét valószínűségi változó. Diszkrét eloszlásfüggvény

Legyen  $X$  egy véletlenszerű változó, amely adott kísérlet kimenetelének értékét jelenti. Feltételezzük, hogy a kísérletnek véges számú kimenetele lehetséges, tehát az  $\Omega$  eseménytér diszkrét véges halmaz ( $X$  összes lehetséges értékeinek halmaza). Az  $X$  valószínűségi változó **eloszlásfüggvénye** egy  $\Omega$  értelmezési tartományú valós értékű  $m$  függvény, amely eleget tesz az alábbi követelményeknek:

$$1. \quad m(\omega) \geq 0, \text{ ahol } \omega \in \Omega \quad (\text{I.1})$$

$$2. \quad \sum_{\omega \in \Omega} m(\omega) = 1. \quad (\text{I.2})$$

Legyen  $E$  egy tetszőleges részhalmaza  $\Omega$ -nak, akkor az  $E$  esemény valószínűsége egy  $P(E)$  szám úgy, hogy:

$$P(E) = \sum_{\omega \in E} m(\omega) \quad (\text{I.3})$$

### Folytonos valószínűségi változó. Az eloszlásfüggvény értelmezése

Tekintsük a következő esetet: véletlenszerűen rámutatunk egy  $X$  pontra a  $[0,1]$  intervallumból. Hányféle kimenetele lehet ennek a kísérletnek? Milyen tulajdonságai vannak ebben az esetben az eseménytérnek? Könnyen belátható, hogy a kísérletnek megszámlálhatatlanul végtelen sok kimenetele lehetséges, és az eseménytér éppen az  $\Omega = [0,1]$  valós intervallum. Látható tehát, hogy az  $X$  folytonos véletlenszerű változó, eloszlásfüggvényét ezért más gondolatmenet alapján kell megadni. Ebben az esetben nem értelmezett a valószínűségnek az a meghatározása, hogy egy adott kimenetel valószínűsége egyenlő a kedvező esetek számának és az összes próbálkozások számának hányadosával.

Az **eloszlásfüggvényt** a következőképpen értelmezzük folytonos valószínűségi változók esetén:

$$P([x, x+dx]) \approx f(x)dx, \quad (\text{I.4})$$

ahol  $P([x, x+dx])$  annak valószínűsége, hogy a változó az  $[x, x+dx]$  intervallumba essék,  $f(x)$  pedig az eloszlásfüggvény.

### Az eloszlásfüggvény tulajdonságai:

$$1. \quad f(x) \geq 0, \forall x \in \mathbb{R} \quad (\text{I.5})$$

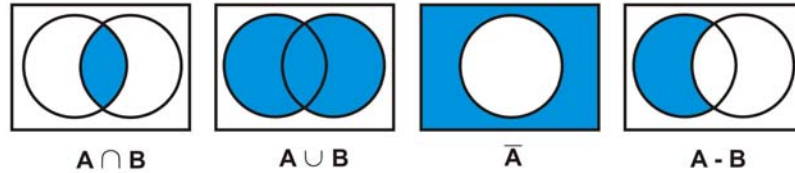
$$2. \quad P(a \leq X \leq b) = \int_a^b f(x)dx, \quad \forall a, b \in \mathbb{R} \quad (\text{I.6})$$

$$3. \quad \int_{\Omega} f(x)dx = 1 \text{ (az eloszlásfüggvény egységre normált)}. \quad (\text{I.7})$$

### I.3 Műveletek eseményekkel, összetett események

Eseményekkel úgy végzünk műveleteket, mint a halmazokkal, ezért a továbbiakban halmazelméleti jelöléseket fogunk használni. Legyen  $A$  és  $B$  két halmaz. Értelmezzük a következő műveleteket:

$$\begin{aligned} A \cup B &= \{x \mid x \in A \vee x \in B\}, \\ A \cap B &= \{x \mid x \in A \wedge x \in B\}, \\ A - B &= \{x \mid x \in A \wedge x \notin B\}, \\ \bar{A} &= \{x \mid x \in \Omega \wedge x \notin A\}. \end{aligned} \quad (\text{I.8})$$



**I.1. ábra:** Halmazokkal végzett műveletek

#### Eseményekkel végzett műveletek legfontosabb tulajdonságai

Legyen az  $\Omega$  eseménytér,  $A, B$  események, és  $P(X)$  jelölje az  $X$  esemény valószínűségét.

$$1. P(A) \geq 0, \forall A \subset \Omega. \quad (\text{I.9})$$

$$2. P(\Omega) = 1. \quad (\text{I.10})$$

$$3. P(A \cup B) = P(A) + P(B) - P(A \cap B) \quad (\text{I.11})$$

$$4. P(\bar{A}) = 1 - P(A), \forall A \subset \Omega \quad (\text{I.12})$$

Tekintsük a dobókockával való dobást mint véletlenszerű folyamatot, és keressük az ezzel kapcsolatos különböző események valószínűségét. Ebben az esetben az eseménytér véges, 6 elemet tartalmaz, az elemek a kocka lapjain levő pontok számát jelölik:

$$\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$$

Feltételezzük, hogy a dobókocka nem „cinkelt”, vagyis bármely lap ugyanolyan valószínűséggel jelentkezik. Az eloszlásfüggvény így:

$$m(i) = \frac{1}{6}, i = 1, 2, \dots, 6.$$

Tekintsük azt az  $E$  eseményt, hogy páros számot dobunk, vagyis  $E = \{2, 4, 6\}$ . Ekkor

$$P(E) = m(2) + m(4) + m(6) = \frac{1}{6} + \frac{1}{6} + \frac{1}{6} = \frac{1}{2}$$

Keressük annak valószínűségét, hogy ne dobjunk egyest vagy hatost. Legyen  $F = \{1, 6\}$ .  $P(\bar{F}) = 1 - P(F) = 1 - \frac{1}{3} = \frac{2}{3}$ .

Adjuk meg annak valószínűségét, hogy párost dobunk vagy hárommal oszthatót. Legyen a két esemény:  $E = \{2, 4, 6\}$ ,  $F = \{3, 6\}$ . Akkor:  $E \cap F = \{2, 3, 4, 6\}$ .

Azonnal belátható:  $P(E \cup F) = \frac{2}{3}$ .

Gyakorlatként ellenőrizzük a 3. tulajdonság helyességét!

## I.4 Fontos eloszlásfüggvények

### Egyenletes eloszlás

#### Diszkrét egyenletes eloszlás:

Legyen  $\Omega$  eseménytér számossága  $n$ . Egyenletes eloszlást mutató véletlenszerű változó eloszlásfüggvénye:  $m(i) = \frac{1}{n}$ ,  $\forall i = 1, 2, \dots, n$  (I.13)

Könnyen belátható, hogy ez eleget tesz az eloszlásfüggvények tulajdonságainak.

#### Folytonos egyenletes eloszlás:

Legyen  $\Omega \subset \mathcal{J}^n$  eseménytér. Értelmezzük az egyenletes eloszlás eloszlásfüggvényét mint

$f(x) = c$ , ahol  $c \in \mathbb{R}$  egy állandó, amelynek értéket a normálási feltételből számítjuk ki:

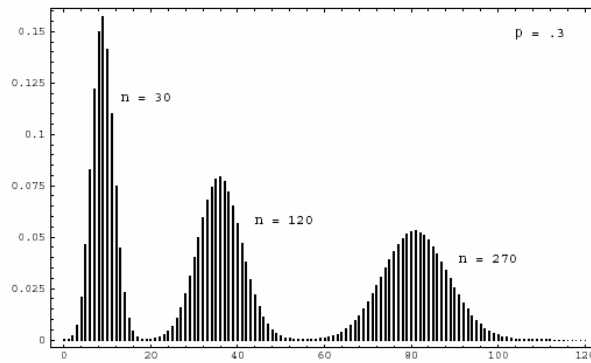
$$\int_{\Omega} f(x) dx = 1. \quad (\text{I.14})$$

### Bernoulli- v. binomiális eloszlás

Adott kísérletnek kétféle kimenetele lehetséges: siker vagy kudarc. Legyen a siker valószínűsége  $p$ , jelöljük  $q = 1-p$ -vel a kudarc bekövetkezési valószínűségét. Keressük annak valószínűségét, hogy  $n$  próbálkozásból pontosan  $k$  kimenetel sikeres. Egy siker bekövetkezési valószínűsége  $p$ , akkor  $k$  siker valószínűsége  $p^k$ . Hasonlóan, a fennmaradó  $n-k$  esetnek kudarcnak kell lennie, ennek valószínűsége  $q^{n-k}$ . Másrészt,  $n$  próbálkozás során  $C_n^k$ -félekeppen valósulhat meg  $k$  kedvező esemény. Összegezve, annak valószínűsége, hogy  $n$  próbálkozásból pontosan  $k$  siker adódik, ha a siker valószínűsége  $p$ :

$$b(n, p, k) = C_n^k p^k q^{n-k} \quad (\text{I.15})$$

Ez az összefüggés az ún. **Bernoulli- vagy binomiális eloszlás**.



**I.2. ábra:** A Bernoulli-eloszlásra kapott szimulációs eredmények. Az ordináta tengelyen  $P(k)=b(n,p,k)$  valószínűséget ábrázoltuk  $k$  függvényében különböző  $n$  értékek esetén ( $p=0.3$  és  $q=0.7$ )

Szükséges kimutatni, hogy  $b(n,p,k)$  valóban eloszlásfüggvény, vagyis, hogy:

1.  $0 < b(n, p, k) < 1$ , bármely  $n \geq k$  és  $0 < p < 1$  esetén.

2. 
$$\sum_{k=1}^n b(n, p, k) = 1.$$

Az 1. azonnal következik  $b(n,p,k)$  alakjából. Könnyen belátható, hogy a 2. összeg nem más, mint a  $(p + q)^n$  kifejtése. Tudjuk viszont, hogy  $p + q = 1$ , ahonnan következik 2. kijelentés. Ezennel bebizonyítottuk, hogy a binomiális eloszlás eleget tesz az eloszlásfüggvényre kiszabott követelményeknek.

### Poisson-eloszlás

Tekintsük a következő fizikában gyakori esetet: adott esemény véletlenszerű időközönként következik be. Azt tudjuk, hogy egységnyi idő alatt átlagosan  $\lambda = konstans$  bekövetkezés történik. (Például egy nagyvárosi rendőrségre véletlenszerű időközönként érkeznek telefonhívások, és a sok éves tapasztalat azt mutatja, hogy átlagban 5 perc alatt 8 telefonhívás érkezik.) Keressük az egységnyi idő alatti bekövetkezések eloszlását.

Kiindulunk a binomiális eloszlásból. Felosztjuk az adott időintervallumot  $n$  egyenlő hosszúságú alszakaszra úgy, hogy egy ilyen rövid időszakra legfennebb egy bekövetkezés essék. Ilyen módon, az a szakasz számít sikernek a binomiális eloszlás tekintetében, amikor történik esemény, a többi szakasz „üres”, vagyis sikertelen. Első lépésben keressük a „siker”  $p$  valószínűségét. Egységnyi idő alatt átlagosan  $\lambda$  siker következik be, használva a Bernoulli-eloszlás jelöléseit, ez nem más, mint  $np$ .

$$\lambda = np$$

$$p = \frac{\lambda}{n}$$

(I.16)

Felhasználva a binomiális eloszlást, keressük a bekövetkezések ( $X$ ) eloszlását:

$$P(X=0) = b(n, p, 0) = (1-p)^n = \left(1 - \frac{\lambda}{n}\right)^n \approx e^{-\lambda}, \text{ ha } n \text{ nagyon nagy szám.}$$

Bármely rögzített  $k$  érték esetén felírható:

$$\frac{b(n, p, k)}{b(n, p, k-1)} = \frac{\lambda - (k-1)p}{kp} \approx \frac{\lambda}{k}, \text{ szintén nagy } n \text{ (tehát kis } p) \text{ értékek esetén.}$$

Ilyenformán:

$$P(X=1) \approx \lambda e^{-\lambda}, \text{ illetve általánosan:}$$

$$P(X=k) \approx \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda} \quad (\text{I.17})$$

Ez utóbbi kifejezés a **Poisson-eloszlást** szolgáltatja. Megadja annak valószínűségét, hogy egységnyi idő alatt pontosan  $k$  bekövetkezés történik.

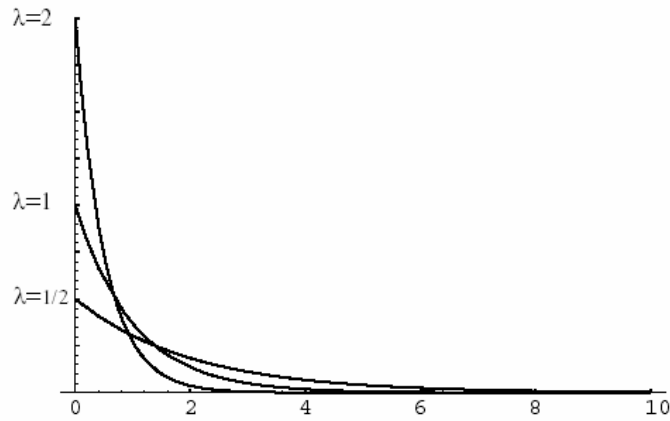
**Gyakorlatként** bizonyítsuk be, hogy a Poisson-eloszlás eleget tesz az eloszlásfüggvények tulajdonságainak!

### Exponenciális eloszlás

Az exponenciális eloszlás egyike a legfontosabb folytonos eloszlásfüggvényeknek. Szoros kapcsolatban áll a Poisson-eloszlással. Tekintsünk ismét véletlenszerű időközönként bekövetkező eseményt. Legyen ez például egy radioaktív próbában két egymás utáni bomlás között eltelt idő. Keressük két egymás utáni bekövetkezés között eltelt idő eloszlásfüggvényét. Erre a célra gyakran alkalmas az ún. exponenciális eloszlásfüggvény:

$$f(x) = \lambda e^{-\lambda x}, \text{ ahol } 0 \leq x < \infty. \quad (\text{I.18})$$

Az eloszlásfüggvény a megnevezett intervallumon kívül nulla értéket vesz fel. A kifejezésben szereplő  $\lambda$  pozitív állandó. Jelentését megadjuk a későbbiekben. **Gyakorlatként** javasoljuk annak bizonyítását, hogy a fenti exponenciális függvény valóban egységre normált, és megadja a kitűzött feladatban annak a valószínűségét, hogy a két véletlenszerű esemény közti idő  $x$  és  $x+dx$  között legyen, ha  $dx$  egységnyi.



**I.3. ábra:** Exponenciális eloszlás különböző  $\lambda$  paraméter-értékekre

Az exponenciális eloszlás segítségével gyakran adunk választ olyan típusú kérdésekre, hogy: „Mennyit kell várni, amíg ...” Legyen  $T$  exponenciális eloszlást követő valószínűségi változó  $\lambda$  paraméterrel. Mi a valószínűsége annak, hogy  $T \leq x$ ?

$$F(x) = P(T \leq x) = \int_0^x \lambda e^{-\lambda t} dt = 1 - e^{-\lambda x}. \quad (\text{I.19})$$

Vizsgáljuk az exponenciális eloszlás egyik legfontosabb tulajdonságát, a **„memória hiányát”**. Kiszámítjuk annak valószínűségét, hogy még kell várni  $s$  időt egy újabb bekövetkezésre, ha már vártunk előzőleg  $r$  időt. Ez egy feltételes valószínűség.

(A feltételes valószínűséget a következőképpen jelöljük és értelmezzük általánosan:

$$P(E | F) = \frac{P(E \cap F)}{P(F)}. \quad (\text{I.20})$$

Megadja annak valószínűségét, hogy bekövetkezik az  $E$  esemény, ha tudjuk, hogy  $F$  esemény már bekövetkezett.)

Jelen esetben az exponenciális eloszlásnál azt fogjuk megmutatni, hogy igaz a következő egyenlőség:

$$P(T > r + s | T > r) = P(T > s) \quad (\text{I.21})$$

Ennek igazolására kiszámítjuk az egyenlőség két oldalán megjelenő valószínűségeket. A jobb oldalon:

$$1 - F(s) = e^{-\lambda s}, \quad (\text{I.22})$$

míg a bal oldalon szereplő feltételes valószínűségre írhatjuk:

$$\frac{P(T > r+s)}{P(T > r)} = \frac{1-F(r+s)}{1-F(r)} = \frac{e^{-\lambda(r+s)}}{e^{-\lambda r}} = e^{-\lambda s}. \quad (\text{I.23})$$

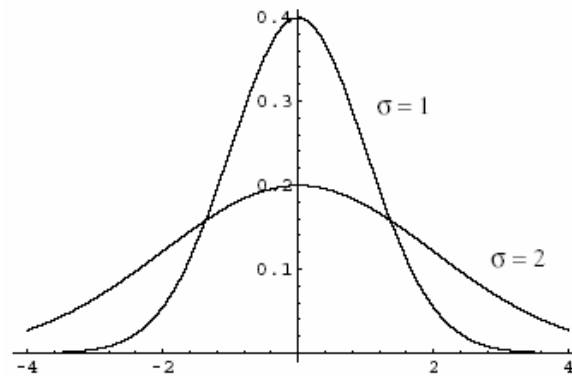
Innen világosan látszik: annak valószínűsége, hogy még  $s$  ideig várni kell egy bekövetkezésre független attól, hogy előzőleg már  $r$  ideig vártunk. Ez az exponenciális eloszlásra jellemző nagyon fontos tulajdonság, a „memória hiánya”. A radioaktív bomlások egymásutáni tanulmányozásakor találkozunk például ilyen típusú eloszlással.

### Normál- vagy Gauss-eloszlás

A legfontosabb, természetben gyakran előforduló eloszlásfüggvény a normál- vagy Gauss-eloszlás. Alakja:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2}, \quad (\text{I.24})$$

ahol  $\mu$  és  $\sigma$  paraméterek, jelentésüket megadjuk a későbbiekben.



**I.4. ábra:** Normáeloszlás eloszlásfüggvénye  $\mu = 0$  esetén

Azon esetben, amikor a paraméterek  $\mu = 0$  és  $\sigma = 1$  értéket vesznek fel, **standard normáeloszlásról** beszélünk. A normáeloszlás hatalmas jelentőségét a természetben a valószínűség-számítás fontos alaptétele, a **közepes határeloszlás tétele** magyarázza. Ezt a tételt kijelentjük, de bizonyítása túllépi jelen jegyzet kereteit, ezért nem bizonyítjuk. (Bizonyítását lásd pl. Charles M. Grinstead és J. Laurie Snell: Introduction to Probability, 10.3 fejezet.)

Köznapi szavakkal kijelentve, a **közepes határeloszlás tétele** kimondja, hogy nagy számú, tetszőleges eloszlást követő valószínűségi változó összegére jellemző eloszlásfüggvény a normáeloszláshoz tart.

Annak igazolása, hogy a normáloszlás valóban eleget tesz az eloszlásfüggvényekkel szemben támasztott követelményeknek, nem azonnali. A normáláshoz ki kell mutatni, hogy:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2} dx = 1. \quad (I.25)$$

A bizonyítás során felhasználjuk, hogy:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = 2 \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}. \quad (I.26)$$

## I.5 Várható érték (átlag), szórás, korreláció

### Várható érték

Tekintsük a következő játékot: dobókockával dobunk. Amennyiben páros számot dobunk, a számnak megfelelő összeget veszítünk, ha páratlant dobunk a számnak megfelelő összeget nyerünk. Például, ha kettést dobunk, veszítünk kettőt, ha hármast dobunk, akkor nyerünk hármat. Fel kell mérni, hogy érdemes-e játszani! Szeretnénk tudni, hogy átlagosan mennyi nyereségre számíthatunk egy dobás során, és ezt a következőképpen számítjuk ki:

$$\mu = 1\left(\frac{1}{6}\right) - 2\left(\frac{1}{6}\right) + 3\left(\frac{1}{6}\right) - 4\left(\frac{1}{6}\right) + 5\left(\frac{1}{6}\right) - 6\left(\frac{1}{6}\right) = -\frac{1}{2}$$

A játék tehát nem nyereséges a játékos számára.

A bevezető példa után értelmezzük diszkrét valószínűségi változó esetén az átlagot (várható értéket): Legyen  $X$  diszkrét valószínűségi változó az  $\Omega$  eseménytérben és  $m(x)$  eloszlásfüggvénnyel. Az  $X$  valószínűségi változó átlagértéke:

$$\mu = E(X) = \langle X \rangle = \sum_{x \in \Omega} x \cdot m(x) \quad (I.27)$$

Amennyiben a fenti összeg nem abszolút konvergens, azt mondjuk, hogy  $X$ -nek nincs jól meghatározott várható értéke.

**Gyakorlatként** bizonyítsuk be, hogy a binomiális eloszlásra jellemző várható érték  $\mu = np$ . Számítsuk ki a Poisson-eloszlás várható értékét is!

Most áttérünk a folytonos eloszlású valószínűségi változók esetére. Legyen adott a folytonos eloszlású valószínűségi változót jellemző  $f(x)$  eloszlásfüggvény. A várható értéket ekkor a következő kifejezés szolgáltatja:

$$\mu = E(X) = \langle X \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} xf(x)dx \quad (I.28)$$

Vizsgáljuk az exponenciális eloszlás esetét. Arra akarunk választ adni, hogy átlagosan mennyi idő telik el például két egymást követő radioaktív bomlás között. A várható érték definíciója alapján:

$$E(X) = \langle X \rangle = \int_0^{\infty} x \cdot \lambda e^{-\lambda x} dx = \frac{1}{\lambda} \quad (\text{I.29})$$

Ezennel értelmezni tudjuk az exponenciális eloszlásra jellemző  $\lambda$  paramétert, ami nem más, mint az átlagérték reciproka. Radioaktív bomlás esetén bomlási állandónak nevezzük, megadja, hogy egységnyi idő alatt átlagosan hány bomlás történik. A Gauss-eloszlás  $\mu$  paramétere szintén az eloszlásra jellemző átlagérték. A számítások elvégzése lényegesen könnyebb a standard alak felhasználásával. **Gyakorlatként** javasoljuk annak igazolását, hogy a standard Gauss-eloszlás ( $\mu = 0$ ) esetén az átlagérték valóban 0. Ilyenkor azt mondjuk, hogy az eloszlás nullára centrált, és az eloszlást jellemző haranggörbe alakja szimmetrikus az  $Oy$  tengelyre nézve.

#### A várható érték tulajdonságai:

Legyen  $X$  és  $Y$  két valós véletlenszerű változó,  $c$  állandó, akkor az átlagértékekre igazak a következő tulajdonságok:

$$1. E(X + Y) = E(X) + E(Y), \quad (\text{I.30})$$

$$2. E(cX) = cE(X). \quad (\text{I.31})$$

Általánosan:

$$E(c_1X_1 + c_2X_2 + \dots + c_nX_n) = c_1E(X_1) + c_2E(X_2) + \dots + c_nE(X_n). \quad (\text{I.32})$$

Legyen  $X$  és  $Y$  egymástól független véletlenszerű változó. Ilyen feltételek mellett:

$$E(XY) = E(X)E(Y). \quad (\text{I.33})$$

#### Szórásnégyzet (variancia), szórás

Legyen  $X$  valós értékű valószínűségi változó várható értéke  $E(X) = \mu$ . Ekkor  $X$  szórásnégyzete (varianciája):

$$V(X) = \sigma^2 = E((X - \mu)^2) = E(X^2 - 2\mu X + \mu^2) = E(X^2) - 2\mu E(X) + \mu^2 = E(X^2) - \mu^2 \quad (\text{I.34})$$

Innen azonnal adódik a szórás vagy standard deviáció kifejezése:

$$D(X) = \sigma = \sqrt{V(X)}. \quad (\text{I.35})$$

A szórásnégyzet tulajdonságai:

$$1. V(cX) = c^2 V(X), \quad (\text{I.36})$$

$$2. V(X + c) = V(X). \quad (\text{I.37})$$

$$3. \text{ Ha } X \text{ és } Y \text{ függetlenek: } V(X+Y) = V(X) + V(Y). \quad (\text{I.38})$$

**Gyakorlatként** ellenőrizzük a fenti állítások helyességét.

### A szórásnégyzet kiszámítása

Mindenek előtt az  $E(X^2)$  mennyiséget kell kiszámítani. Diszkrét esetben:

$$E(X^2) = \langle X^2 \rangle = \sum_{x \in \Omega} x^2 m(x) \quad (\text{I.39})$$

Innen a szórásnégyzetre kapjuk, hogy:

$$V(X) = E(X^2) - (E(X))^2 = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 \quad (\text{I.40})$$

Folytonos esetben:

$$E(X^2) = \langle X^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 f(x) dx \quad (\text{I.41})$$

Ezután a diszkrét esethez hasonlóan számítjuk a szórásnégyzetet.

**A szórásnégyzet megadja a valószínűségi változónak az átlagtól való közepes négyzetes eltérését.**

**Gyakorlatként** bizonyítsuk be, hogy a Bernoulli-eloszlás szórásnégyzete  $\sigma^2 = npq$ .

A normáleloszlás esetén a  $\sigma^2$  paraméter éppen a szórásnégyzetet jelenti. A számításokat ismét könnyebb elvégezni a standard normáleloszlás esetére, és ellenőrizhető, hogy ha  $\sigma = 1$  paraméterrel dolgozunk, akkor a szórásnégyzetre is 1-et kapunk.

**Gyakorlatként** számítsuk ki a  $\lambda$  paraméterű exponenciális eloszlás szórásnégyzetét!

### Korreláció

Legyen  $X$  és  $Y$  két véletlenszerű változó. Értelmezzük a két változó **kovarianciáját** mint:

$$\text{cov}(X, Y) = E((X - \mu(X))(Y - \mu(Y))) \quad (\text{I.42})$$

A kovariancia tulajdonságai:

$$1. \text{ cov}(X, Y) = E(XY) - E(X)E(Y) \quad (\text{I.43})$$

$$2. \text{ cov}(X, Y) = 0, \text{ ha } X \text{ és } Y \text{ egymástól függetlenek.} \quad (\text{I.44})$$

$$3. V(X + Y) = V(X) + V(Y) + 2\text{cov}(X, Y) \quad (\text{I.45})$$

Értelmezzük most az  $X$  és  $Y$  változók **korrelációját** mint:

$$\rho(X, Y) = \frac{\text{cov}(X, Y)}{\sqrt{V(X)V(Y)}} \quad (\text{I.46})$$

Azonnal következik, hogy:  $-1 \leq \rho(X, Y) \leq 1$ .

## II. Függelék

### A Dirac-delta funkcionál és tulajdonságai

Ezen függelék keretében az általunk sokszor használt Dirac-delta funkcionál tulajdonságait tárgyaljuk. Gyakorlatként és példaként az egydimenziós rendszerekre megoldjuk a stacionárius Schrödinger-egyenletet egy Dirac-delta alakú potenciálvölgyben található részecske esetére.

#### II.1 A Dirac-delta funkcionál és tulajdonságai

A funkcionál egy általánosított függvényt jelent. A Dirac-delta funkcionál matematikai értelmezése:

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty; x = 0 \\ 0; x \neq 0 \end{cases} \quad (\text{II.1})$$

úgy, hogy:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1 \quad (\text{II.2})$$

Legyen  $\varphi(\xi)$  egy tetszőleges függvény  $L_2$ -ből, akkor a következő egyenletek szintén a Dirac-delta funkcionált értelmezik:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\xi) \varphi(\xi) d\xi = \varphi(0) \quad (\text{II.3})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\xi - a) \varphi(\xi) d\xi = \varphi(a) \quad (\text{II.4})$$

A fenti értelmezés alapján a Dirac-deltát *mintavételezési függvénynek* is nevezik. Néhány jól ismert folytonos függvény határértékben megközelíti a Dirac-függvényt:

$$\delta(x) = \lim_{\nu \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin \nu x}{x}; \quad (\text{II.5})$$

$$\delta(x) = \lim_{\nu \rightarrow \infty} \frac{\nu}{\sqrt{\pi}} e^{-\nu^2 x^2}; \quad (\text{II.6})$$

$$\delta(x) = \lim_{\nu \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\nu}{\nu^2 x^2 + 1}; \quad (\text{II.7})$$

$$\delta(x) = \lim_{\nu \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2 \nu x}{\nu x^2}; \quad (\text{II.8})$$

A Dirac-függvénynek a következő fontos tulajdonságai vannak:

1.  $\delta(-x) = \delta(x)$
2.  $x\delta(x) = 0$
3.  $f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a)$
4.  $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x), a \neq 0$
5.  $\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2|a|}[\delta(x-a) + \delta(x+a)]$
6.  $\delta[f(x)] = \sum_{i=1}^n \frac{\delta(x-x_i)}{\left|\frac{df}{dx}\right|_{x=x_i}},$

ahol  $x_i$  az  $f(x) = 0$  egyenlet gyökei,  $n$  a gyökök száma.

7.  $\frac{d}{dx}\delta(-x) = -\frac{d}{dx}\delta(x)$ , vagyis a Dirac-delta elsőrendű deriváltja páratlan függvény.

Azokra a függvényekre, amelyek nem négyzetesen integrálhatók, értelmezzük a Dirac-deltához való normálást:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(a, x) \Psi(a', x) dx = \delta(a - a') \quad (\text{II.9})$$

### Megoldott feladat:

Bizonyítsuk be, hogy:

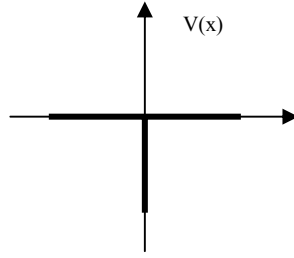
$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk \quad (\text{II.10})$$

Tekintsük a következő integrált:

$$I_1 = \lim_{a \rightarrow \infty} \int_{-a}^a e^{ikx} dk = \lim_{a \rightarrow \infty} \left. \frac{e^{ikx}}{ix} \right|_{-a}^a = \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{e^{iax} - e^{-iax}}{ix} = \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{2 \sin ax}{x}. \quad (\text{II.11})$$

Felhasználva az (II.5.) összefüggést, következik a (II.10) összefüggés, amit bizonyítani kellett. Ezzel kimutattuk azt, hogy az  $f(x) = 1$  függvénynek a Fourier-transzformáltja éppen a Dirac-delta.

## II.2 Részecske egy Dirac-delta alakú potenciálban



Tanulmányozzuk most egy kvantummechanikai részecske stacionárius állapotaiban a lehetséges hullámfüggvényeket és energiaszinteket, amikor a részecske  $V(x) = -\beta \cdot \delta(x)$  alakú Dirac-delta potenciálban található, ahol  $\beta$  pozitív konstans és  $E < 0$ .

A rendszert leíró stacionárius Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = [\beta \delta(x) - |E|] \psi(x) \quad (\text{II.12})$$

Tekintsük azon tartományokat, ahol  $x \neq 0$ . Ebben a két tartományban a Schrödinger-egyenletek alakja:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} &= -|E| \psi_1(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_2(x)}{dx^2} &= -|E| \psi_2(x) \end{aligned} \quad (\text{II.13})$$

A hullámfüggvényre kiszabott feltételek: a hullámfüggvény folytonos az  $x = 0$  pontban, de nem folytonosan deriválható (a potenciális energiának végtelen nagyságú szakadási pontja van). Másrészt megköveteljük, hogy a hullámfüggvény a végtelenben nullához tartson.

$$\begin{aligned} \psi_1(0) &= \psi_2(0); \\ \lim_{x \rightarrow -\infty} \psi_1(x) &= 0; \\ \lim_{x \rightarrow \infty} \psi_2(x) &= 0; \end{aligned} \quad (\text{II.14})$$

Az egyenletek megoldását ezen határfeltételek alapján

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A e^{kx} \\ \psi_2(x) &= A e^{-kx}; \end{aligned} \quad (\text{II.15})$$

$$k = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}; \quad (\text{II.16})$$

alakban keressük.

Visszatérünk most a (II.12) stacionárius Schrödinger-egyenlethez, amit integrálunk  $-x_0$  és  $x_0$  határok között, majd határértékben tartunk  $x_0$ -val nullához. Felhasználjuk azt a tulajdonságot, hogy:

$$\int_{-x_0}^{x_0} \beta \delta(x) \psi(x) dx = \beta \psi(0) \quad (\text{II.17})$$

Formálisan elvégezve (II.12)-ben az integrált:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d\psi(x)}{dx} \right) \Big|_{x_0} + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d\psi(x)}{dx} \right) \Big|_{-x_0} = \beta \psi(0) - \int_{-x_0}^{x_0} |E| \psi(x) dx \quad (\text{II.18})$$

Áttérünk most a következő határértékre:  $x_0 \rightarrow 0$  jobbról,  $-x_0 \rightarrow 0$  balról. Ekkor azt kapjuk, hogy:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'_2(0) + \frac{\hbar^2}{2m} \psi'_1(0) = \beta \psi(0), \quad (\text{II.19})$$

ahonnan kiolvasható, hogy a hullámfüggvény nem folytonosan deriválható. Elvégezve a behelyettesítéseket,  $k$ -ra a következő értéket adódik:

$$k = \frac{\beta m}{\hbar^2} \quad (\text{II.20})$$

Egyenlővé téve az (II.16) és (II.20) összefüggéseket, a részecske energiájára a következő feltétel adódik:

$$|E| = \frac{\beta^2 m}{2\hbar^2} \Rightarrow E = -\frac{\beta^2 m}{2\hbar^2} \quad (\text{II.21})$$

Látható tehát, hogy Dirac-delta típusú potenciálgödörben található részecskének egyetlen stacionárius megengedett állapota van, amelyhez tartozó energiaértéke (II.21).

Keressük meg az  $A$  együttható értékét úgy, hogy a stacionárius állapotban levő hullámfüggvény normált legyen:

$$A^2 \int_{-\infty}^0 e^{2kx} dx + A^2 \int_0^{\infty} e^{-2kx} dx = 1 \quad (\text{II.22})$$

Azonnali számítások után:

$$A = \sqrt{k} = \frac{\sqrt{m\beta}}{\hbar} \quad (\text{II.23})$$

A stacionárius állapotban hullámfüggvény alakja tehát a Dirac-delta típusú potenciálgödörben:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{\sqrt{m\beta}}{\hbar} e^{\frac{m\beta}{\hbar^2} x}, & x < 0 \\ \frac{\sqrt{m\beta}}{\hbar} e^{-\frac{m\beta}{\hbar^2} x}, & x > 0 \end{cases} \quad (\text{II.24})$$

Ahogy ezt megtanultuk, ezen stacionárius állapotban a részecske tartózkodási valószínűség-sűrűségét a hullámfüggvény modulusának négyzete adja meg:

$$|\psi(x)|^2 = \begin{cases} \frac{m\beta}{\hbar} e^{\frac{2m\beta}{\hbar^2}x}, & x < 0 \\ \frac{m\beta}{\hbar} e^{-\frac{2m\beta}{\hbar^2}x}, & x > 0 \end{cases} \quad (\text{II.25})$$

### **III. Függelék**

#### **A nemrelativisztikus kvantummechanika rövid története**

Röviden, időrendi sorrendbe szedve összefoglaljuk a kvantummechanika kialakulásának a mérföldköveit.

**1895** – A Röntgen-sugárzás felfedezése egyelőre magyarázat nélkül (1901-ben Röntgennek ítélik oda az első fizikai Nobel-díjat).

**1896–1898** – Bequerel és a Curie-házaspár felfedezi a radioaktív sugárzást és a radioaktív bomlást (1903-ban Nobel-díjjal tüntetik ki őket).

**1897** – J. J. Thomson felfedezi az elektront, 1906-ban Nobel-díjat kap.

**1900** – Planck bevezeti az energiakvantum fogalmát, így a kísérleti eredményekkel megegyező törvényt kap a feketetest-sugárzására. Csak jóval később, 1918-ban kap Nobel-díjat ezért a magyarázataért.

**1905** – Einstein bevezeti a fény kvantumelméletét, melynek segítségével magyarázza a fényelektromos hatást.

**1911** – Rutherford „aranyfüst” kísérlete: alfa-részecskék szóródását vizsgálta aranyatomokon, és az eredmények alapján megalkotta az atomnak azt a modelljét, mely szerint az nagyon kis méretű pozitív töltésű atommagból és körülötte keringő elektronokból áll.

**1911–1912** – Bragg (apa és fia) és Max von Laue kísérletei: Röntgen-sugarak szóródása kristályrácsra, amely lehetővé teszi a kristályok szerkezetének tanulmányozását, illetve alátámasztja az elektromágneses sugárzás hullámtermészetét. Max von Laue 1914-ben, Braggék 1915-ben kapnak ezért a munkásságukért Nobel-díjat.

**1913** – Niels Bohr publikálja az atom bolygómodelljét. Fő érdeme, hogy magyarázatot ad a diszkrét energiaszintek létezésére, és megfogalmazza a spektrumvonalak fő törvényeit. (1922-ben Nobel-díjat kap)

**1914** – Franck és Herz kísérlete alátámasztja az atomok Bohr-modelljét, az atomok (a kísérletben Hg-atomok) energiája csak jól meghatározott diszkrét értéket vehet fel. (1925-ben ők kapják a fizikai Nobel-díjat)

**1910–1916** – Millikan kísérleti úton megméri az elemi elektromos töltés értékét, később pedig a Planck-állandót. (1923-ban neki ítélik oda a fizikai Nobel-díjat)

**1921** – Einstein Nobel-díjat kap munkásságáért, különös tekintettel a fényelektromos hatás magyarázatára. Érdekességként megemlíjtük, hogy Einstein még 1921 előtt megalkotta a relativitáselméletet, mégsem ezt emeli ki a Nobel-díj bizottság.

**1921** – A Stern és Gerlach által ezüstatomokkal végzett kísérlet eredménye egyértelműen utal a spin létezésére, elméleti magyarázat azonban még nincs.

**1923** – Compton kísérletileg vizsgálja egy fotonnak nyugalomban levő elektronon való szóródását. Relativisztikus hatásokat is figyelembe vesz. (1927-ben Nobel-díjat kap)

**1924** – De Broglie megvédi a doktori disszertációját, amelyben kiterjeszti a hullám-részecske kettős természetet minden objektumra (1929-ben Nobel-díjat kap).

**1925** – Heisenberg kidolgozza és publikálja a mátrixmechanikát. Ezzel majdnem egyidőben Schrödinger teljesen más gondolatmenettel más kvantummechanikai egyenlethez jut el, amely a hullámmechanika alapegyenlete. Később Schrödinger bebizonyítja, hogy a két megközelítés egyenértékű. 1932-ben Heisenberget, 1933-ban pedig Schrödingert Nobel-díjjal tüntetik ki a kvantummechanika megalkotásáért és alkalmazásáért.

**1925** – Pauli megfogalmazza a kizárási elvet. Fontos megjegyezni, hogy ekkor az elektronspin még nem volt bevezetve, és a kizárási elv ért is csak sokkal később, 1945-ben jutalmazták Nobel-díjjal.

**1926–1927** – Dirac megalkotja a kvantummechanika általános formalizmusát (Dirac-formalizmus). 1933-ban Schrödingerrel megosztva Nobel-díjat kap.

**1927** – Davisson és Germer Ni-kristályon elektronok szóródását és interferenciáját figyelik meg. Ez a kísérlet egyértelmű bizonyítéka az elektronszám hullámok létének. 1937-ben Davisson ezért a felfedezésért Nobel-díjat kap.

**1927** – Heisenberg megfogalmazza a később róla elnevezett határozatlansági relációt.

**1928** – Megjelenik a relativisztikus hullámegyenlet (Dirac-egyenlet), amely a spin szabadsági fokra is magyarázatot ad. Ezennel megnyílik az út a relativisztikus elmélet általános kidolgozására, illetve a kvantumtérelmélet megalkotására.

Nyomdai előkészítés: Incitato  
Nyomda: Gewalt Promotion  
Kiadói ívek száma: 5,15  
Nyomdai ívek száma: 10,25