

# Kvantummechanika A

Jegyzet Katz Sándor előadása alapján

Vanó Lilla, Tajkov Zoltán

novidad21@gmail.com

2015. január 4.

## Tartalomjegyzék

<b>1. Történeti áttekintés</b>	<b>3</b>
1.1. Hőmérsékleti sugárzás . . . . .	3
1.2. Atomok színe . . . . .	5
<b>2. Hullámmechanika</b>	<b>6</b>
2.1. A Schrödinger-egyenlet „levezetése” . . . . .	6
2.2. Várható értékek . . . . .	8
<b>3. A Schrödinger-egyenlet</b>	<b>10</b>
3.1. Egydimenziós eset . . . . .	10
3.1.1. Szabad részecske . . . . .	10
3.1.2. Határozatlansági reláció . . . . .	11
3.1.3. Mozgás potenciálban . . . . .	11
3.1.4. Harmonikus oszcillátor . . . . .	12
3.1.5. Oszcillátoralgebra . . . . .	15
3.2. 3 dimenziós Schrödinger egyenlet . . . . .	16
3.2.1. Centrális potenciál . . . . .	16
3.2.2. A hidrogénatom . . . . .	21
3.2.3. Két test probléma . . . . .	24
<b>4. Axiomatikus kvantummechanika</b>	<b>25</b>
4.1. I. axióma . . . . .	26
4.1.1. Dirac jelölés . . . . .	27
4.2. II. Axióma . . . . .	27
4.3. Várható értékek . . . . .	29
4.3.1. Függvények . . . . .	29
4.3.2. Határozatlansági reláció . . . . .	29
4.4. Operátorok spúrja . . . . .	30
4.5. Diád . . . . .	30
4.6. Sűrűség operátor . . . . .	31

4.6.1.	Neumann-entrópia . . . . .	32
4.7.	Szimmetriák . . . . .	32
4.7.1.	Wigner-tétel . . . . .	33
4.7.2.	Folytonos szimmetriák . . . . .	34
4.7.3.	Térbeli eltolás . . . . .	35
4.7.4.	Időbeli eltolás . . . . .	36
4.7.5.	Forgatási szimmetria, a Spin . . . . .	38
4.7.6.	$\hat{J}^2$ és $\hat{J}_3$ spektruma . . . . .	41
4.7.7.	Véges dimenziós irreducibilis ábrázolások . . . . .	43
4.7.8.	Impulzusmomentumok összeadása . . . . .	45
4.8.	Azonos részecskék . . . . .	50
4.8.1.	Kicszerelődési kölcsönhatás . . . . .	51
4.8.2.	Tükrözések . . . . .	55
<b>5.</b>	<b>Közelítő módszerek</b>	<b>56</b>
5.1.	Időfüggetlen perturbációszámítás . . . . .	56
5.1.1.	Degenerált eset . . . . .	59
5.2.	Hidrogén atom finomfelhasadása . . . . .	60
5.2.1.	Zeeman-effektus . . . . .	60
5.2.2.	Stark-effektus . . . . .	63
5.3.	Variációs módszer . . . . .	67
5.3.1.	Harmonikus Oszcillátor . . . . .	67
5.3.2.	Hélium atom alapállapota . . . . .	69
5.3.3.	Hidrogénmolekula ion . . . . .	71
5.4.	Wentzel-Kramers-Brillouin közelítés . . . . .	73
5.4.1.	Alagút effektus . . . . .	75
5.4.2.	Alfa-bomlás . . . . .	75
5.4.3.	Illesztés a fordulási pontoknál . . . . .	76
5.5.	Időfüggő perturbációszámítás . . . . .	78
5.5.1.	Monokróm hatás . . . . .	79
5.5.2.	Hidrogén atom fényben . . . . .	81
5.5.3.	Véletlenszerű perturbáció . . . . .	83
5.5.4.	Spontán emisszió . . . . .	85
<b>6.</b>	<b>Kanonikus formalizmus és pályaintegrál</b>	<b>85</b>
6.1.	Kanonikus kvantálás . . . . .	86
6.2.	Feynman-féle pályaintegrál . . . . .	88
<b>7.</b>	<b>Szórásszámítás</b>	<b>90</b>
7.1.	1D-s szórás . . . . .	90
7.1.1.	Szórás véges potenciálgödörben . . . . .	91
7.2.	3D-s szórás . . . . .	91
7.2.1.	Parciális hullámanalízis . . . . .	94
7.2.2.	Born-közelítés . . . . .	99

<b>8. Összefonódott állapotok</b>	<b>101</b>
8.1. Bell-egyenlőtlenségek . . . . .	101
8.2. Kvantum-számítógépek . . . . .	103

## 1. Történeti áttekintés

A 19. század végén voltak még megoldatlan problémák a fizika néhány területén. Ezekből a problémákból nőtte ki magát Einstein speciális relativitáselmélete, illetve a kvantummechanika. Mik is voltak ezek a problémák?

### 1.1. Hőmérsékleti sugárzás

Valamilyen  $T$  hőmérsékletű testtel egyensúlyban lévő sugárzásnak vizsgálták az energiasűrűségét, ez volt a problémás dolog. Tekintsünk egy  $L$  oldalhosszúságú kockát (dobozt), amit felmelegítettünk  $T$  hőmérsékletűre. A kérdés a következő: milyen energiasűrűség alakul ki a dobozon belül?

Keressük tehát a  $\rho(\nu, T)$  függvényt. Amely a  $\nu$  frekvencia körüli  $d\nu$  frekvenciaintervallumba eső kisugárzott energiaáramot adja. Erre vonatkozóan voltak kísérletek, melyek a számolással nem egyeztek. Hogyan számolták?

Legyen tehát egy  $L^3$  doboz, benne az elektromágneses sugárzással. Meg kell oldani a Maxwell-egyenleteket periodikus határfeltételek mellett. A pontos számolást nem végezzük el, ezt már előző elektrodinamika kurzusokon megtették, csupán a mondanivaló szempontjából fontos lépéseket elevenítjük fel. Az  $\mathbf{E}$  elektromos tér és a  $\mathbf{B}$  mágneses indukcióvektor oszcillálni fog, azaz:

$$\mathbf{E}, \mathbf{B} \sim e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}} e^{-i\omega t} \quad (1.1.1)$$

A periodikus határfeltételek miatt  $\mathbf{q}$  kvantált lesz:

$$\mathbf{q} = \frac{2\pi}{L} \mathbf{n} \quad (1.1.2)$$

ahol  $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$  egész számok.

Ezzel már a frekvenciát is fel tudjuk írni:

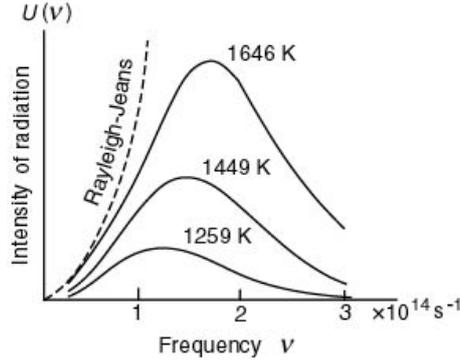
$$\lambda = \frac{2\pi}{|\mathbf{q}|} \quad \nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{cq}{2\pi} = \frac{cn}{L} \quad (1.1.3)$$

Most meg kell mondani a módusok számát egy adott  $\nu$  és  $\nu + d\nu$  között. Ehhez le kell számolni, hogy hány ilyen síkhullámot tudok felírni, legyen ez  $N(\nu)d\nu$ . Ez pont egy  $d\nu$  gömbhéj, ennek a térfogata:  $4\pi n^2 dn$ : ennyi rácspont van  $n$  és  $dn$  között. Ehhez még érkezik egy kettes faktor a lehetséges polarizációk miatt:

$$N(\nu)d\nu = 2 \cdot 4 \cdot \pi n^2 dn. \quad (1.1.4)$$

Most már csak egy  $\nu \rightarrow n$  összefüggés kell:

$$n^2 = \frac{L^2}{c^2} \nu^2, \quad dn = \frac{L}{c} d\nu \quad (1.1.5)$$



1. ábra. A Rayleigh–Jeans-törvény és a tapasztalat

$$N(\nu)d\nu = 8\pi \left(\frac{L}{c}\right)^3 \nu^2 d\nu \quad (1.1.6)$$

Enni módus van. Megnézzük, hogy egy ilyen módusra mennyi energia jut, majd azt ezzel felszorozzuk. Ehhez használjuk az ekvipartíció tételét:

$$\bar{E}(T) = k_B T \quad (1.1.7)$$

A teljes energiasűrűség  $\nu$  és  $\nu + d\nu$  között:

$$\rho(\nu, T)d\nu = \frac{8\pi k_B T \nu^2 d\nu}{c^3} = 8\pi \frac{k_B T}{c^3} \nu^2 d\nu \quad (1.1.8)$$

Ezt nevezzük *Rayleigh–Jeans törvénynek*. A kísérletekkel összevetve azt látjuk, hogy ez kis  $\nu$  frekvenciák esetén igaz lesz. De ha  $\nu$ -vel egyre messzebb megyünk, akkor az eltérés igen nagy lesz. Sőt a modell lehetetlent jósol: ha az energiasűrűséget felösszegezzük az összes módusra, akkor az divergálni fog. Ezt nevezik ultraibolya katasztrófának. Ez nyilván nem azt jelenti, hogy valóban ez a helyzet, hanem csak jelzi számunkra, hogy az elmélet valahol hibás.

Megoldásként próbáltak olyan függvényt találni, amely a kísérletekkel jó egyezést mutat(1. ábra). Planck mindenféle elméleti megfontolások nélkül egyszerűen illesztett egy függvényt a kísérleti eredményekre, beépített egy exponenciális levágást, az illesztéshez egyetlen paramétert kellett belőnie, ezt  $h$ -val jelölte, ez a *Planck-állandó*, melynek értéke  $h = 6.63 \cdot 10^{-34}$  Js. Az általa kapott görbe egyenlete:

$$\rho(\nu, T)d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3 d\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} \quad (1.1.9)$$

Ha  $\frac{h\nu}{k_B T} \ll 1$ , akkor sorfejtéssel visszkapjuk a klasszikus elektrodinamika Rayleigh–Jeans-törvényét.

Nem sokkal később született meg a hipotézis, amelyből ezt az eredményt származtatni tudta. A következőt tételte fel: a sugárzási tér olyan oszcillátorokkal van egyensúlyban, melyeknek az energiája kvantált:  $E_n = nh\nu$ . Planck tehát nem a sugárzás kvantáltságát tételte fel, az Einstein volt.

Ebből Lorentz vezette le a Planck-törvényt a következő képpen: feltette azt a kérdést, hogy hol rontjuk el a számolást? A válasz az, hogy az ekvipartíciónál:  $\bar{E} \neq k_B T$ . Hol lehet ezt látni? Annak a valószínűsége, hogy egy tartályban lévő  $T$  hőmérsékletű gáz energiája  $E$  és  $E + dE$  között van  $\sim e^{-\beta E}$ , ahol  $\beta \equiv \frac{1}{k_B T}$ . Ezt persze még normálni kell:

$$p(E) dE = \frac{e^{-\beta E} dE}{\int_0^{\infty} e^{-\beta E} dE} \quad \rightarrow \quad \bar{E}(T) = \frac{\int_0^{\infty} E e^{-\beta E} dE}{\int_0^{\infty} e^{-\beta E} dE} = \frac{1}{\beta} = k_B T \quad (1.1.10)$$

Itt feltételeztük, hogy az energia folytonos. Ha ezzel szemben kvantált energiát tételezünk fel:

$$p(E_i) = \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n}} \quad \rightarrow \quad \bar{E}(T) = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n e^{-\beta E_n}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n}} \quad (1.1.11)$$

Most felhasználjuk Planck hipotézisét, miszerint  $E_n = nh\nu$ . Így egy geometriai sort kapunk, amit fel tudunk összegezni:

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta h\nu n} = \frac{1}{1 - e^{-\beta h\nu}}; \quad \sum_{n=0}^{\infty} h\nu n e^{-\beta h\nu n} = \frac{h\nu e^{-\beta h\nu}}{(1 - e^{-\beta h\nu})^2} \quad (1.1.12)$$

Az energia várható értéke ennek a kettőnek a hányadosa:

$$\bar{E}(T) = \frac{h\nu}{e^{\beta h\nu} - 1} \quad (1.1.13)$$

## 1.2. Atomok színe

Rutherford kísérlete bizonyította, hogy létezik atommag, amely az atom központi egysége. Ez tartalmazza tömegének nagy részét. A mag körül helyezkednek el a könnyebb, negatív töltésű elektronok. Rutherford azt feltételezte, hogy az elektronok körpályákon keringenek mag Coulomb-terében.

A mérések szerint azonban gázok spektruma éles vonalokból áll, vagyis a megvalósuló körpályák sugara nem tetszőleges, csak bizonyos, diszkrét értékeket vehet fel.

A Rutherford-modell nagy hátránya, hogy az így elképzelt atom nem lehetne stabil. A körpályán mozgó elektronok gyorsuló töltések, vagyis sugároznak. Az elektrodinamika törvényei szerint az elektronoknak bele kellene zuhanniuk a magba, ezt pedig nem tapasztaljuk.

Ezt az ellentmondást Bohr oldotta fel. Úgy gondolta, hogy az elektronok nem keringhetnek akármilyen pályán, nem lehet akármekkora az energiájuk, hanem kvantáltak és csak akkor sugároznak, ha egyik pályáról a másikra "ugranak", miközben megfelelő nagyságú energiájú fotont nyelnek el vagy sugároznak ki. Ezzel már meg lehet magyarázni a hidrogénszerű atomok színeképét. De mi volt a leírás alapja?

Bohr ötlete nyomán: a  $h$  Planck-állandó impulzusmomentum dimenziójú, akkor kézenfekvő, hogy legyen az kvantált:

$$mvr = n\hbar, \quad (1.2.1)$$

ahol  $n$  pozitív egész és  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ . Az  $e$  töltésű elektront a  $Ze$  magtöltésű atommag Coulomb-tere tartja  $r$  sugarú körpályán:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze_0^2}{r^2}, \quad (1.2.2)$$

ahol  $e_0^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ . Az elektron energiájára így az

$$E_n = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze_0^2}{r} = -\frac{mZ^2e_0^4}{2n^2\hbar^2} \approx -13.6 \frac{\text{eV}}{c^2} \frac{Z^2}{n^2} \quad (1.2.3)$$

kifejezés adódik.

Egy  $n_1 \rightarrow n_2$  ( $E_{n_1} > E_{n_2}$ ) atomi átmenethez tartozó foton frekvenciája:

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{mZ^2e_0^4}{2\hbar^2} \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right). \quad (1.2.4)$$

Sommerfeld ezt bármely zárt rendszerre általánosította. Ha egy  $N$  szabadsági fokú, időben periodikus mozgás leírható  $H(q_a, p_a)$  Hamilton-függvénnyel, akkor a kvantálási feltételek:

$$\oint p_a dq_a = n_a h, \quad a = 1 \dots N, \quad (1.2.5)$$

ahol a mozgás egy periodusára kell integrálni.

Például körpálya esetén, ahol  $p = L$  és  $q = \phi$ :

$$\int_0^{2\pi} L d\phi = nh = 2\pi L = nh, \quad \text{vagyis} \quad L = n\hbar. \quad (1.2.6)$$

## 2. Hullámmechanika

### 2.1. A Schrödinger-egyenlet „levezetése”

A fénynek kettős természete van: a Maxwell-egyenletek hullámmegoldásaként jön ki, de Einstein kvantum hipotézisében részecske, amit számos kísérlet nagy pontossággal igazolt.

De Broglie-nak támadt egy ötlete: ha a hullámnak vélt fény részecskéként is tud viselkedni, akkor vizsgáljuk meg a fényt mint hullámot, és ezt alkalmazzuk részecskékre. A fotonra teljesül az  $E = \hbar\omega$  összefüggés. Ezen kívül:

$$E = \hbar\omega \rightarrow p = \hbar k \quad (2.1.1)$$

Ha ezt elfogadjuk, akkor a Bohr-feltétel azt jelenti, hogy „amíg az elektron körbekereng a mag körül, közben éppen egész számnyit hullámzik”:

$$2\pi r = n\lambda = n \frac{2\pi}{k} = n \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{nh}{mv}. \quad (2.1.2)$$

Visszakaptuk az  $mvr = n\hbar$  Bohr-feltételt. Ez persze egy nagyon naiv elképzelés.

Mindenesetre, ha  $\Psi(\mathbf{x}, t)$  síkhullám, azaz  $\Psi(\mathbf{x}, t) \sim e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)}$ , akkor ki kell elégítenie a következő differenciálegyenleteket:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi \quad (2.1.3)$$

$$-i\hbar \nabla \Psi = \mathbf{p}\Psi \quad (2.1.4)$$

Az időfüggés triviálisan leválasztható:  $\Psi(\mathbf{x}, t) = \psi(x) e^{-i\omega t} = \psi(\mathbf{x}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ . Az energia és az impulzus között van egy reláció:  $E = \frac{p^2}{2m}$ . Ez felírható differenciálegyenlet formájában:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi \quad (2.1.5)$$

Ha leválasztottuk az időfüggést:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi = E\psi \quad (2.1.6)$$

Ezt persze lehet általánosítani. Ha adott egy  $V(\mathbf{x})$  potenciál:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x) + V(\mathbf{x})\psi(x) = E\psi(x) \quad \text{Időfüggetlen Schrödinger-egyenlet} \quad (2.1.7)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x})\Psi(\mathbf{x}, t) \quad \text{Időfüggő Schrödinger-egyenlet} \quad (2.1.8)$$

Az előző gondolatmenetet könnyű általánosítani több részecskére. De mi az a  $\Psi$ ? Eredetileg úgy gondolták, hogy  $\Psi(\mathbf{x}, t)$  egy kiterjedt részecskét ír le, ezért azt várták, hogy  $|\Psi(\mathbf{x}, t)|^2$  mint egy intenzitás megmutatja, hogy hol tartózkodik a részecske. Bohr erre rácaffolt: kiszámoltatott mindenféle szórási problémát és az jött ki neki, hogy a szórás után a részecske úgy mindenfelé van. Kísérletileg azonban nem ez jött ki.

Aztán jött Born, aki szerint a  $|\Psi(\mathbf{x}, t)|^2$  nem a részecske „mennyisége”, hanem megtalálásának valószínűsége. Pontosabban megfogalmazva  $dP = |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3x$  annak a valószínűsége, hogy a részecskét az  $\mathbf{x}$  körüli  $d^3x$  dobozban találjuk.

Kétféle elképzelés volt:

a) Az egyik szerint ez egyszerűen nem a teljes kép. Ez csak egy statisztikus leírás, de ha megtaláljuk az alapvetőbb elméletet, akkor nem valószínűségeket fogunk kapni. Egyszerűen azért vannak valószínűségek, mert nem vettünk figyelembe mindent. Ez a rejtett paraméterek esete.

b) A másik felfogás szerint a világ nem determinisztikus, csak valószínűségeket kaphatunk.

Sok idő eltelt az első vita óta és úgy néz, hogy a b) lesz az igaz. A valószínűség nem úgy értendő, hogy egymás után sokszor elvégezve a mérést kapok egy gyakoriságot, hanem azonosan preparált részecskék viselkedése egyszerűen nem determinisztikus.

De van-e egyáltalán értelme a valószínűségi értelmezésnek? Ehhez szükséges egyfajta normálás. Elvárjuk a részecskétől, hogy ha mindenhol keressük, akkor találjuk is meg:

$$\int |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3x = 1 \quad (2.1.9)$$

A Schrödinger egyenlet lineáris, vagyis ha  $\Psi(\mathbf{x}, t)$  megoldás, akkor  $\lambda\Psi(\mathbf{x}, t)$  is megoldás. Vagyis, ha sikerül találni olyan  $\Psi$ -t, amely megoldja az egyenletet és  $\int |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3x =$

$N < \infty$ , akkor  $\frac{1}{\sqrt{N}}\Psi(\mathbf{x}, t)$  is megoldás, és ennek már az integrálja 1 lesz. De  $\Psi$  változhat időben is. Megmarad-e a valószínűség?

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3x = i\hbar \int \left( \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi + \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Psi^* \right) d^3x =$$

Kihasználjuk a Schrödinger-egyenletet:

$$= \int d^3x \left\{ \left( \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^* \right) \Psi - \left( \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi \right) \Psi^* \right\} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x \{ \nabla (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \}.$$

Parciális integrálunk, kihasználjuk, hogy  $\Psi$  a végtelenben lecseng:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = 0 \quad (2.1.10)$$

Összehasonlítás után látszik, hogy:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 + \nabla \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (2.1.11)$$

ahol  $\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$ . Ez egy kontinuitási egyenlet.

## 2.2. Várható értékek

A hely várható értéke:

$$\langle \mathbf{x} \rangle = \int \mathbf{x} |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3x. \quad (2.2.1)$$

Az impulzus várható értéke:

$$\langle \mathbf{p} \rangle = -i\hbar \int \Psi^* \nabla \Psi d^3x. \quad (2.2.2)$$

Klasszikusan  $\mathbf{p} = m\mathbf{v} = m \frac{d\mathbf{x}}{dt}$ .

$$m \frac{d}{dt} \langle \mathbf{x} \rangle = m \frac{d}{dt} \int \mathbf{x} |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3x = m \int \mathbf{x} \left( \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi + \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Psi^* \right) d^3x \quad (2.2.3)$$

$$= \frac{i\hbar}{2} \int \mathbf{x} \nabla (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) d^3x \quad (2.2.4)$$

Parciális integrálunk

$$\rightarrow m \frac{d}{dt} \langle x_k \rangle = \frac{i\hbar}{2} \int x_k \partial_l (\Psi^* \partial_l \Psi - \Psi \partial_l \Psi^*) d^3x \quad (2.2.5)$$

$$x_k \partial_l (\Psi^* \partial_l \Psi - \Psi \partial_l \Psi^*) = \partial_l (x_k \Psi^* \partial_l \Psi - \Psi \partial_l \Psi^*) - \delta_{kl} (\Psi^* \partial_l \Psi - \Psi \partial_l \Psi^*) \quad (2.2.6)$$

$$-\frac{i\hbar}{2} \int (\Psi^* \partial_k \Psi - \Psi \partial_k \Psi^*) d^3x = -i\hbar \int \Psi^* \partial_k \Psi d^3x = \langle p_k \rangle \quad (2.2.7)$$



Tehát:

$$m \frac{d}{dt} \langle \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{p} \rangle \quad (2.2.8)$$

Ezek alapján már mindenféle fizikai mennyiséget fel tudunk építeni.

Általános mennyiség legyen az  $A(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ , mely szorzásokat és gradienseket tartalmazó operátor. Ennek az operátornak a várható értéke:

$$\langle A \rangle = \int \Psi^* A \Psi d^3x \quad (2.2.9)$$

Mivel a Schrödinger egyenlet lineáris, így ha találunk  $\Psi_1, \Psi_2$  megoldást, akkor ezeknek a lineáris kombinációja is megoldás lesz.

A lehetséges  $\Psi$ -k tere a négyzetes integrálható függvények Hilbert-tere az  $L^2$  függvénytér, ami eleget tesz a következő tulajdonságoknak:

- $(\Psi_1 + \Psi_2)(x) = \Psi_1(x) + \Psi_2(x)$
- $\lambda \Psi(x) = (\lambda \Psi)(x)$
- $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle := \int \Psi_1^*(x) \Psi_2(x) d^3x$

Ezeket a függvényeken lehet operátorokat értelmezni a következő módon:

$\hat{A} : \Psi \rightarrow \hat{A}\Psi$  lineáris leképezés akkor, ha

$$(\lambda_1 \hat{A}_1 + \lambda_2 \hat{A}_2)\Psi = \lambda_1(\hat{A}_1\Psi) + \lambda_2(\hat{A}_2\Psi)$$

Operátorokat lehet összeszorozni is, ez annyit jelent, hogy sorrendben haddatjuk őket egymás után. Általában ez nem lesz kommutatív, vagyis  $\hat{A}_1\hat{A}_2 \neq \hat{A}_2\hat{A}_1$ . Ennek a jellemzésére használjuk a kommutátort:

$$[\hat{A}_1, \hat{A}_2] = \hat{A}_1\hat{A}_2 - \hat{A}_2\hat{A}_1 \quad (2.2.10)$$

Minden operátorhoz rendelhető egy  $\hat{A}^\dagger$ , ami definíció szerint:

$$\langle \hat{A}\Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_1 | \hat{A}^\dagger\Psi_2 \rangle. \quad (2.2.11)$$

Ezt nevezzük az adott operátor adjungáltjának. Ha egy operátor megegyezik az adjungáltjával, akkor azt önadjungáltnak, más szóval hermitikusnak nevezzük.

Lássuk be, hogy a  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$  impulzus operátor önadjungált!

$$\langle \Psi_1 | \hat{\mathbf{p}}^\dagger \Psi_2 \rangle = \langle \hat{\mathbf{p}}\Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int (\hat{\mathbf{p}}\Psi_1)^* \Psi_2 d^3x = \int (-i\hbar\nabla\Psi_1)^* \Psi_2 d^3x \quad (2.2.12)$$

$$= \int i\hbar\nabla\Psi_1^* \Psi_2 d^3x = - \int i\hbar\Psi_1^* \nabla\Psi_2 d^3x = \int \Psi_1^* (-i\hbar\nabla\Psi_2) d^3x = \langle \Psi_1 | \hat{\mathbf{p}}\Psi_2 \rangle \quad (2.2.13)$$

Hasonló képpen be lehet látni azt is, hogy a koordináta komponenssel vett szorzás operátora önadjungált.

Klasszikus fizikában értelmeztük a Hamilton-függvényt, mely potenciálban mozgó részecskére  $H = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{x})$ . Az előzőekhez hasonlóan értelmezzük a Hamilton-operátort:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\mathbf{x}) \quad (2.2.14)$$

Eddig  $t$  le volt fixálva, most nézzük meg hogyan változik  $\Psi$ , ha az idő is változik. A Schrödinger-egyenlet formálisan felírva:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (2.2.15)$$

Ha nem tudunk semmit mondani  $\Psi$ -ről, akkor is könnyedén leválaszthatjuk az időfüggést. Legyen  $\Psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}) f(t)$ .

$$i\hbar \psi(\mathbf{x}) \dot{f}(t) = f(t) \hat{H} \psi(\mathbf{x}) \quad (2.2.16)$$

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = \frac{1}{\psi(x)} \hat{H} \psi(x) = \text{konst} (= E) \quad (2.2.17)$$

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = E \rightarrow f(t) = \text{konst} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad (2.2.18)$$

A  $\hat{H}\psi = E\psi$  egy sajátérték egyenlet, a rendszer lehetséges energiaértékei a sajátértékek.

## 3. A Schrödinger-egyenlet

### 3.1. Egydimenziós eset

A (2.2.15) egyenletet egy dimenzióban vizsgáljuk:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t). \quad (3.1.1)$$

Természetesen mindig figyelembe kell venni a normálási feltételt:  $\int d^3x |\Psi(x, t)|^2 = 1$ . Időfüggetlen esetben:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x). \quad (3.1.2)$$

#### 3.1.1. Szabad részecske

Tekintsünk egy  $m$  tömegű szabad részecskét! Ekkor  $V(x) = 0$ , azaz

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) = E \psi(x) \rightarrow \psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad (3.1.3)$$

ahol  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ , vagyis  $\frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$ .

Időfüggetlen esetben

$$\Psi(x, t) = A e^{i(kx - \frac{E}{\hbar} t)} + B e^{-i(kx + \frac{E}{\hbar} t)}. \quad (3.1.4)$$

Ez egy síkhullám,  $v$  sebességgel halad. Mi ezzel a baj? De Broglie szerint  $\frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}$ . Mi nem ezt kaptuk. Sőt a síkhullám nem is normálható. Ennek az az üzenete, hogy részecske jól meghatározott energiával és impulzussal nem létezhet.

Annyira azért nem rossz a helyzet, az  $e^{\pm ikx}$  függvények kiválóan alkalmazhatóak bázisnak  $\Psi$ -k terén.

Hogy kellene ezt interpretálni? Az  $Ae^{\pm ikx}$  egy  $|A|^2$  intenzitású részecskenyaláb. A normálási probléma kiküszöbölhető. Tudjuk, hogy ez a síkhullám megoldás. Mivel a Schrödinger egyenlet lineáris, így ezek lineáris kombinációja is megoldás. Azt meg viszont már tudjuk normálni:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)}. \quad (3.1.5)$$

$t = 0$  esetén:

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(k) e^{ikx}. \quad (3.1.6)$$

Ez egy Fourier-transzformált, ennek inverze megadja  $\phi(k)$ -t:

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x, 0) e^{-ikx}. \quad (3.1.7)$$

Ez már tetszőleges  $\Psi(x, t)$ -re normálható.  $\phi(k)$ -kból előállítható a megoldás:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(k) e^{i(kx - \omega t)}. \quad (3.1.8)$$

Vezessük be a  $v_f = \frac{\omega}{k}$  fázissebességet és a  $v_{cs} = \frac{d\omega}{dk}$  csoportsebességet. Jelen esetben  $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ , ahonnan  $v_f = \frac{\hbar k}{2m}$  és  $v_{cs} = \frac{\hbar k}{m}$ . Minden módus sebessége más és más, ezért a hullámcsomag „szétfolyik”.

### 3.1.2. Határozatlansági reláció

$$\sigma_x^2 = \langle \Delta x^2 \rangle = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - 2 \langle x \rangle \langle x \rangle + \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (3.1.9)$$

$$\sigma_p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 \quad (3.1.10)$$

Síkhullámra úgy kell gondolni, hogy meghatározott  $\mathbf{p}$  impulzussal rendelkezik, de  $\sigma_p = 0!$ . Ekkor  $\sigma_x$  egy rosszul definiált dolog.

### 3.1.3. Mozgás potenciálban

Most  $V(x) \neq 0$  megoldásokat keresünk 1 dimenzióban. Milyen esetek lehetségesek?

Előfordulhat olyan eset, hogy az energia kisebb, mint a potenciál értéke (l. ??). Az ábrán látható állapotot nevezzük kötött állapotban. Ellenkező esetben szórásállapotnak nevezzük.

Állítás: Tegyük fel, hogy  $V(x \rightarrow \pm\infty) = 0$ . Ekkor, ha  $E > 0$  az a szórásállapot, ha  $E < 0$  az a kötött állapot.

Példaként vizsgáljunk kötött állapotokat 1 dimenziós dobozba zárt részecske esetére. Ezt a ???. ábrán látható potenciál definiálja:

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

Ha  $V$  folytonos, akkor  $\Psi$  és  $\Psi'$  folytonos a határon. Ha  $V$ -nek ugrása van, akkor  $\Psi''$  is ugrani fog. Abban az esetben, ha  $V$  végtelen, akkor  $\Psi'$  ugrik és  $\Psi$  lesz folytonos. Jelen esetben ezek szerint a határfeltétel:  $\Psi(0) = \Psi(L) = 0$ .

$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)\Psi$ . Ennek az egyenletnek a megoldása:  $\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ , ahol  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ . Illesztjük a határfeltételekhez:

$$\begin{aligned} \Psi(0) = 0 &\rightarrow A + B = 0 \rightarrow \Psi(x) = C \sin kx \\ \Psi(L) = 0 &\rightarrow C \sin kL = 0 \rightarrow kL = n\pi \end{aligned}$$

ahol  $n = 1, 2, 3, \dots$

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} L = n\pi \rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} \quad (3.1.11)$$

Ez lesz a kvantálási feltétel. Az  $n = 0$  esetet azért zártuk ki, mert abban az esetben a hullámfüggvény nem lett volna normálható. Már csak  $C$  értékét kell belőni, ehhez kell a normálási feltétel:

$$\int_0^L |C|^2 \sin^2 \left( \frac{n\pi}{L} x \right) dx = |C|^2 \frac{L}{2} \quad (3.1.12)$$

$$C = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot e^{i\phi} \quad (3.1.13)$$

Az együtthatóban megjelenik egy tetszőleges egységnyi fázis, ezt egynek választjuk.

A végeredményünk tehát:

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left( \frac{2\pi}{L} x \right) \quad (3.1.14)$$

### 3.1.4. Harmonikus oszcillátor

A harmonikus oszcillátort a potenciáljával definiáljuk:

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (3.1.15)$$

Analitikusan fogjuk megoldani a problémát. Tekintsük a Schrödinger egyenletet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Psi = E \Psi \quad (3.1.16)$$

Gyakori eljárással fogunk élni: vezessünk be egy dimenziótlan változót, hogy ne kelljen a faktorokat magunkkal hurcolni. Legyen tehát  $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$ . Ezzel írjuk fel a Schrödinger egyenletet:

$$\frac{d^2 \Psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - k) \Psi \quad (3.1.17)$$

ahol  $k = \frac{2E}{\hbar\omega}$ .

Vizsgáljunk egy limeszt, amikor is  $\xi$  nagy:  $\xi \rightarrow \infty$ . Úgy is gondolhatunk rá, hogy  $\xi^2 \gg k$ . Ekkor a Schrödinger egyenlet a következő képen alakul:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \xi^2} = \xi^2 \Psi \quad (3.1.18)$$

3.1.18 egy Oszcillátor egyenlet, ennek ismerjük a megoldásait:

$$\Psi(\xi \rightarrow \infty) = Ae^{-\frac{\xi^2}{2}} + Be^{\frac{\xi^2}{2}} \quad (3.1.19)$$

Fizikai megfontolásokból  $B = 0$ , különben a valószínűség-sűrűségfüggvény nem lenne normálható.

Azt trükköt fogjuk alkalmazni, hogy leválasztjuk az aszimptotikus megoldást az egyenletről:  $\Psi(\xi) = h(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ .

$$\frac{d\Psi}{d\xi} = \frac{dh}{d\xi}e^{-\frac{\xi^2}{2}} - h\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} = e^{-\frac{\xi^2}{2}} \left( \frac{dh}{d\xi} - h\xi \right) \quad (3.1.20)$$

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} = \left( \frac{d^2h}{d\xi^2} - h - 2\frac{dh}{d\xi}\xi + h\xi^2 \right) e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad (3.1.21)$$

Visszaírjuk ezt a 3.1.17 egyenletbe:

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\frac{dh}{d\xi}\xi + (k-1)h = 0 \quad (3.1.22)$$

A megoldást keressük hatványsor alakjában!

$$h(\xi) = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j \quad (3.1.23)$$

Ekkor:

$$\frac{dh}{d\xi} = \sum_{j=0}^{\infty} j a_j \xi^{j-1} \quad (3.1.24)$$

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} = \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1) a_j \xi^{j-2} \quad (3.1.25)$$

Kelleni fog még a  $\xi \frac{dh}{d\xi} = \sum_{j=0}^{\infty} j a_j \xi^j$ , illetve vegyük észre, hogy 3.1.25 átindexelhető, mivel  $j = 0$  és  $j = 1$  esetén is 0 lesz.

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} = \sum_{j=0}^{\infty} (j+2)(j+1) a_{j+2} \xi^j \quad (3.1.26)$$

Ha mindezt visszaírjuk 3.1.22 egyenletbe és kiemelünk  $\xi^j$ :

$$\sum_{j=0}^{\infty} \xi^j [(j+2)(j+1)a_{j+2} - 2ja_j + (k-1)a_j] = 0 \quad (3.1.27)$$

Ennek igaznak kell lennie minden  $\xi$ -re, ami csak akkor lehet, hogyha a zárójelben szereplő együtthatók nullák. Így kapunk egy rekurzív összefüggést:

$$a_{j+2} = \frac{2ja_j - (k-1)a_j}{(j+1)(j+2)} = \frac{2j - (k-1)}{(j+1)(j+2)}a_j \quad (3.1.28)$$

Bontsuk ezt a hatványsor alakot páros, illetve páratlan részekre!

$$h_{ps} = a_0 + a_2\xi^2 + a_4\xi^4 + \dots \quad (3.1.29)$$

$$h_{ptl} = a_1 + a_3\xi^3 + a_5\xi^5 + \dots \quad (3.1.30)$$

Most vizsgáljuk meg, hogy is viselkedik a rekurzió nagy  $j$ -kre!

$$a_{j+2} \approx \frac{2}{j}a_j \rightarrow a_j \approx \frac{c}{\left(\frac{j}{2}\right)!} \quad (3.1.31)$$

$$h_{ps} \approx \sum_{j=2k}^{\infty} \frac{c}{\left(\frac{j}{2}\right)!} \xi^j \approx \sum_k^{\infty} c \frac{\xi^{2k}}{k!} \approx ce^{\xi^2} \quad (3.1.32)$$

$$h_{ptl} \approx \sum_{j=2k+1}^{\infty} \frac{c}{\left(\frac{j}{2}\right)!} \xi^j \approx ce^{\xi^2} \quad (3.1.33)$$

Ami nagy baj, mert ha ezt visszaírjuk:

$$h(\xi) = h_{ps} + h_{ptl} \approx ce^{\xi^2} \quad (3.1.34)$$

$$\Psi(\xi) = h(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}} \approx e^{\frac{\xi^2}{2}} \quad (3.1.35)$$

ami pedig nem normálható. Egyetlen kiút van: a  $\xi$  hatványsora nem véges. Létezik olyan  $j$ , melyre  $a_j = 0$ ,  $a_{j+1} = 0 \dots$  Azaz

$$\frac{2j+1-k}{(j+1)(j+2)} = 0 \quad \text{valamely } j = n \text{ esetén} \quad (3.1.36)$$

Ebből következik, hogy  $k = 2n + 1$ .

$$\left. \begin{array}{l} k = \frac{2E}{\hbar\omega} \\ k = 2n + 1 \end{array} \right\} E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

És ez a kvantálási feltételünk. Az  $\frac{1}{2}$ -től eltekintve Planck ugyanezt tételezte fel. Még a hullámfüggvény nincs meg! Nézzünk meg néhány esetet:

-  $n = 0$ ,  $a_0 \neq 0$  az összes többi tag nulla!

$$\Psi_0(\xi) = a_0 e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \quad (3.1.37)$$

-  $n = 1$ ,  $a_{2k} \neq 0$ ,  $a_1 \neq 0$  az összes többi tag nulla!

$$\Psi_1(\xi) = a_1 \xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad E_0 = \frac{3\hbar\omega}{2} \quad (3.1.38)$$

$$- n = 2, a_2 = -a_1$$

$$\Psi_2(\xi) = a_0(1 - 2\xi^2)e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad E_0 = \frac{5\hbar\omega}{2} \quad (3.1.39)$$

Látszik, hogy a páros és páratlan függvények ortogonálisak. Az  $\frac{a_0}{a_1}$  tetszőlegesen normálható, mi  $2^n \xi^n$ -re normálunk. Az így normált hullámfüggvényünk a következő alakú:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{n\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad (3.1.40)$$

ahol  $H_n$  az úgynevezett Hermite-polinomok.

### 3.1.5. Oszcillátoralgebra

Jelen fejezettől kezdve az operátorokat akkor jelöljük a szokásos  $\hat{\cdot}$  jellel, ha ez nem egyértelmű!

Írjuk fel az egy dimenziós harmonikus oszcillátor Schrödinger egyenletét:

$$\frac{1}{2m} \left[ \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + (m\omega x)^2 \right] \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (3.1.41)$$

A zárójelben két mennyisége négyzetösszege szerepel, jó lenne ezt faktorizálni a szokásos  $u^2 + v^2 = (u - iv)(u + iv)$  módon. Azonban  $u$  és  $v$  most nem számok, hanem operátorok, így ez nem működik, mivel  $uv \neq vu$ . Ennek ellenére vezessünk be két új operátort:  $a^+$ -t és  $a^-$ -t a következőképpen:

$$\hat{a}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2m}} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \pm im\omega x \right) = \frac{1}{\sqrt{2m}} (\hat{p} \pm im\omega \hat{x}) \quad (3.1.42)$$

$$\hat{a}_+ \cdot \hat{a}_- f(x) = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - im\omega x \right) \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} + im\omega x \right) f(x) = \quad (3.1.43)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \frac{\hbar}{2} \omega \quad (3.1.44)$$

Hasonló módon:

$$\hat{a}_- \cdot \hat{a}_+ = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - \frac{\hbar}{2} \omega \quad (3.1.45)$$

Vagyis:

$$\hat{a}_- \cdot \hat{a}_+ - \hat{a}_+ \cdot \hat{a}_- = [\hat{a}_-, \hat{a}_+] = \hbar\omega \quad (3.1.46)$$

Ha ezzel a két operátorral írjuk fel a Schrödinger egyenletet:

$$\left( \hat{a}_+ \cdot \hat{a}_- + \frac{\hbar\omega}{2} \right) \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (3.1.47)$$

Vegyük észre, hogyha  $\Psi$  megoldás  $E$  energiával, akkor ezekkel az operátorokkal tudunk új megoldásokat csinálni, például  $a_+ \Psi$  is megoldás,  $E + \hbar\omega$  energiával, ugyanis:

$$\left( \hat{a}_+ \cdot \hat{a}_- + \frac{\hbar\omega}{2} \right) a_+ \Psi(x) = a_+ a_- a_+ \Psi + \frac{\hbar\omega}{2} a_+ \Psi = \quad (3.1.48)$$

$$= a_+ \left( E + \frac{\hbar\omega}{2} \right) \Psi + \frac{\hbar\omega}{2} a_+ \Psi = (E + \hbar\omega) a_+ \Psi \quad (3.1.49)$$

Hasonlóképpen belátható, hogy ha  $\Psi$  megoldás  $E$  energiával, akkor  $a_- \Psi$  is megoldás,  $E - \hbar\omega$  energiával.

Tegyük fel, hogy létezik 1 darab megoldás. Ebből azonban probléma lesz, mert lát-szólag  $a_-$ -szal léptetve, előbb utóbb az energia negatív lesz. De, ha  $\Psi$  normálható, akkor  $a_+ \Psi$  is. Az  $a_- \Psi$  nem biztos, hogy normálható, de az integrál attól még lehet véges (0). Tehát kell lennie egy olyan,  $\Psi_0$  alapállapotú hullámfüggvénynek, melyre  $a_- \Psi_0 = 0$ !

$$\hat{a}_- = \frac{1}{\sqrt{2m}} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - im\omega x \right) \Psi_0(x) = 0 \quad (3.1.50)$$

$$\frac{d}{dx} \Psi_0 = -\frac{m\omega}{\hbar} x \Psi_0 \quad (3.1.51)$$

$$\ln \Psi_0(x) = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \ln C \quad (3.1.52)$$

$$\Psi_0(x) = C e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \rightarrow \text{előző jelöléssel } \Psi_0(x) = C e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad (3.1.53)$$

Ez tehát az alapállapotú függvény, nézzük meg, hogy mekkora energia tartozik hozzá! Mivel az eredményt abból a feltételből kaptuk, hogy tovább már nem tudjuk csökkenteni az energiát:

$$\left( \hat{a}_+ \cdot \hat{a}_- + \frac{\hbar\omega}{2} \right) \Psi(x)_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \Psi(x)_0 \rightarrow E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \quad (3.1.54)$$

Van egy alapállapotú hullámfüggvény és  $a_+$ -szal tudjuk "feljebb léptetni". De kiadnak-e ezek minden megoldást? Ha lenne közben más energiaérték is, akkor onnan már megint le tudnánk jutni nullába. Így tehát megtaláltuk az összes megoldást:

$$\Psi_n(x) = A_n \cdot \underbrace{a_+ \cdot \dots \cdot a_+}_{n \text{ db}} \Psi_0(x) = A_n \hat{a}_+^n \Psi_0(x) \quad (3.1.55)$$

Megmutatható, hogy  $\hat{a}_+^n$  éppen a Hermite-polinomokat adja.

## 3.2. 3 dimenziós Schrödinger egyenlet

A Schrödinger-egyenlet három dimenziós, időfüggetlen alakja:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}) = E \Psi(\mathbf{x}) \quad (3.2.1)$$

Az egyenlet megoldása szerencsés esetben történhet a változók szétválasztásának mód-szerével, például dobozba zárt részecske esetén:  $\Psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$ .

### 3.2.1. Centrális potenciál

Ez azt jelenti, hogy  $V(\mathbf{x})$  csak  $\mathbf{x}$  nagyságtól függ:  $V(\mathbf{x}) = V(r)$ .

A Schrödinger-egyenlet egy sajátértékegyenlet, a  $\hat{H}$  sajátértékegyenlete. Ha egy ope-rátor és a Hamilton-operátor kommutál, akkor meg lehet úgy választani  $\Psi$ -ket, hogy mindkét operátornak közös sajátfüggvény-rendszere legyen. Ez általában egy működő stratégia. Érdekes tehát olyan operátort keresni, ami kommutál a Hamilton-operátorral.



Impulzusmomentum klasszikus értelmezése:  $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ ,  $L_i = \sum_{i,l} \varepsilon_{ilm} x_l p_m$ . Ezek alapján, szokásos módon bevezetjük az impulzusmomentum-operátort:

$$\hat{L} = \hat{x} \times \hat{p} = x \times (-i\hbar\nabla) \quad (3.2.2)$$

$$L_i = -i\hbar \sum_{kl} x \frac{\partial}{\partial x_k} \quad (3.2.3)$$

Állítás: az impulzusmomentum-operátor minden komponense kommutál a Hamilton-operátorral:

$$[\hat{L}_i, \hat{x}_j] = \varepsilon_{ijk} x_k i\hbar \quad (3.2.4)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{p}_j] = \varepsilon_{ijk} \frac{\partial}{\partial x_k} i\hbar \quad (3.2.5)$$

Minden koordinátákból és impulzusokból kikevert operátor kommutációs relációja is ugyanilyen.

$$[\hat{L}_i, \hat{v}_j] = \varepsilon_{ijk} \hat{v}_k i\hbar \quad (3.2.6)$$

Ez speciálisan magára az impulzusmomentum-operátorra is igaz:

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k i\hbar \quad (3.2.7)$$

Vektor négyzetére:

$$[\hat{L}_i, \hat{v}_j^2] = [\hat{L}_i, \hat{v}_j \hat{v}_j] = L_i v_j v_j - v_j v_j L_i = L_i v_j v_j - v_j L_i v_j + v_j L_i v_j - v_j v_j L_i \quad (3.2.8)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{v}_j] \hat{v}_j + \hat{v}_j [\hat{L}_i, \hat{v}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} v_k v_j + i\hbar \varepsilon_{ijk} v_j v_k = 0 \quad (3.2.9)$$

Ebből már következik, hogy  $[L_i, \nabla^2] = 0$ ,  $[L_i, x^2] = 0$ . Tehát találtunk egy olyan operátort, ami kommutál a Hamilton-operátorral. Ez gyakorlatilag a gömbszimmetria következménye.

Összefoglalva:

$$[\hat{L}_i, \hat{L}^2] = 0 \quad (3.2.10)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{H}] = 0 \quad (3.2.11)$$

$$[\hat{L}, \hat{H}] = 0 \quad (3.2.12)$$

Jelöljük ki egy tengelyt, legyen az a  $z$  és ilyenkor az  $\hat{L}_z$ ,  $\hat{L}^2$  és  $\hat{H}$  kommutál egymással. Most az a következő cél, hogy megtaláljuk azokat a  $\Psi$ -ket, amelyek mind a háromnak sajátfüggvényei.

Mivel gömbszimmetrikus a probléma, érdemes áttérni gömbi polár-koordinátarendszerre:

$$x_1 = r \sin \theta \sin \phi \quad \theta \in [0 : \pi] \quad (3.2.13)$$

$$x_2 = r \sin \theta \cos \phi \quad \phi \in [0 : 2\pi] \quad (3.2.14)$$

$$x_3 = r \cos \theta \quad r \in [0 : \infty[ \quad (3.2.15)$$

Ezekkel felírva:

$$\hat{L}_1 = i\hbar \left( \sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \quad (3.2.16)$$

$$\hat{L}_2 = i\hbar \left( -\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \quad (3.2.17)$$

$$\hat{L}_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \quad (3.2.18)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] \quad (3.2.19)$$

Érdeemes észrevenni, hogy az impulzusmomentum-operátor és négyzete nem tartalmazza a sugarat.

$L_i$  és  $L^2$  hermitikus operátorok.

Idézzük fel a  $\Delta$  operátor alakját gömbi polár-koordinátarendszerben:

$$\Delta_{r,\theta,\phi} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] \quad (3.2.20)$$

$$\Delta_{r,\theta,\phi} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \quad (3.2.21)$$

Ezt írjuk vissza a Schrödinger-egyenletbe:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \Psi + \frac{L^2}{2mr^2} \Psi + V(r)\Psi = E\Psi \quad (3.2.22)$$

Ha sikerülne  $\Psi$ -t megválasztani úgy, hogy  $\hat{L}^2$  sajátvektora legyen, akkor  $\hat{L}^2\Psi$  csak egy konstans lesz,  $r$  marad változó.

Keressük meg  $\hat{L}^2$  sajátfüggvényeit. Tegyük fel, hogy  $V(r)$  nem nagyon szinguláris  $r = 0$ -ban (ezt később tisztázzuk).

$$\Psi(r) \sim \sum_{ijk} C_{ijk} x_1^j x_2^i x_3^k \quad (3.2.23)$$

Tegyük fel, hogy a legalacsonyabb rend ebben a sorban  $l$ . Tehát  $i + j + k \geq l$ .

Például

$$l = 0 \quad \Psi(x) = \text{const} \quad (3.2.24)$$

$$l = 1 \quad \Psi(x) = ax_1 + bx_2 + cx_3 \quad (3.2.25)$$

$$\text{stb.} \quad (3.2.26)$$

Ugyanez sugárral felírva:  $\Psi(r) \sim r^l Y(\theta, \phi)$ . Írjuk vissza tippet a Schrödinger-egyenletbe!

$$L^2\Psi = \hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial\Psi}{\partial r} \right) + 2mr^2 [E - V(r)] \Psi \quad (3.2.27)$$

Hogy viselkedik ez  $r \rightarrow 0$  esetén?

A második tag  $2mr^2[E - V(r)] \rightarrow 0$ , ha  $V(r)$  nem annyira szinguláris.

$$L^2\Psi(r \rightarrow 0) = \hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) r^l Y = \hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} r^2 l r^{l+1} Y = \hbar^2(l+1) l r^l Y = \hbar^2(l+1) l \Psi \quad (3.2.28)$$

Kicsi  $r$  környékén ezt adja, de akkor minden esetben ezt adja. Ebből következik, hogy  $L^2$  sajátértéke csak  $\hbar^2 l(l+1)$  lehet.

Legyen a  $\Psi$  a  $\hat{H}$ -nak és  $\hat{L}^2$ -nek is sajátfüggvénye, ekkor a sajátérték csak  $\hbar^2 l(l+1)$  lehet. De milyen  $l$ -lek fogják ezt biztosítani?

$$\hat{L}^2\Psi = \hbar^2 l(l+1) \Psi \quad (3.2.29)$$

Mivel  $\hat{L}^2$  csak a szögekre hat, így teljesen mindegy, hogy mi az  $r$  függés. Vezessünk be egy általános  $r$ -től függő függvényt és írjuk fel a hullámfüggvényt a következő alakban:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi) \quad (3.2.30)$$

$$\hat{L}^2 Y(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y(\theta, \phi) \quad (3.2.31)$$

$Y$  legyen  $\hat{L}_3$ -nak is sajátfüggvénye, valamilyen  $m$  sajátértékkel!

$$\hat{L}_3 Y = \hbar m Y \quad (3.2.32)$$

$\hat{L}_3$  hatását konkrétan is kiírva:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} Y = \hbar m Y \quad (3.2.33)$$

Mivel  $Y$  függ  $\theta$ -tól és  $\phi$ -től is, de a 3.2.33-ban szereplő deriválás csak  $\phi$ -re hat, válasszuk le a  $\phi$  függést és legyen:

$$Y = e^{im\phi} P(\theta) \quad (3.2.34)$$

Mivel  $Y$   $l$ -ben periodikus,  $m$  muszáj, hogy egész legyen.

Írjuk be a Schrödinger-egyenletbe:  $Y$  egy az egyben kiesik, ugyanis:

$$\hat{L}^2\Psi = R(r)l(l+1)\hbar^2 Y \quad (3.2.35)$$

Így:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R + V(r)R = ER \quad (3.2.36)$$

Hajtsunk végre egy változócsere, legyen  $U(r) = rR(r)$ . Ezzel az egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 U}{dr^2} + \left[ \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] U = EU \quad (3.2.37)$$

Ez olyan, mint egy egy dimenziós egyenlet, néhány apró eltéréstől eltekintve:

- 1)  $V \rightarrow V_{eff} = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$
- 2)  $r \in [0, \infty[$
- 3) Van egy plusz határfeltétel  $r \rightarrow 0$  esetén:  $U(r) \sim r^{l+1}$

Normálás is ad nekünk plusz feltételeket:

$$\int |\Psi|^2 d^3x = 1 \quad (3.2.38)$$

Ugyanez polárkoordinátákban kifejezve:

$$\int r^2 dr d\Omega |R(r)Y(\theta, \phi)|^2 = \int_0^\infty r^2 dr |R(r)|^2 \cdot \underbrace{\int d\Omega |Y(\theta, \phi)|^2}_{\text{Ez véges lesz}} \quad (3.2.39)$$

Innen a normálhatóság feltétele:  $\int_0^\infty r^2 dr |R(r)|^2$  legyen véges, vagyis  $\int_0^\infty dr |U(r)|^2$  legyen véges.

De mik ezek a  $Y$ -ok? Tudjuk, hogy két számtól függenek,  $l$ -től és  $m$ -től.

Foglaljuk össze mit tudunk róluk:

$$\left. \begin{aligned} \hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) &= \hbar^2(l+1)l Y_{lm}(\theta, \phi) \\ \hat{L}_3 Y_{lm}(\theta, \phi) &= \hbar m Y_{lm}(\theta, \phi) \\ \Delta(r^l Y_{lm}) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.2.40)$$

Másrésztől  $r^l Y_{lm}$   $l$ -ed fokú polinom  $x_i$ -ben, ami annyi tesz, hogy:

$r^l Y_{lm} = \sum_{c_1, c_2, c_3} x_1^{c_1} \cdot x_2^{c_2} \cdot x_3^{c_3} \cdot \lambda_i$  úgy, hogy  $c_1 + c_2 + c_3 = l$ .

Térjünk át új változókra, legyen:  $x_\pm = x_1 \pm ix_2$ .  $r^l Y_{lm}$  továbbra is  $l$ -ed fokú polinom  $x_\pm$  és  $x_3$  függvényében:

$$r^l Y_{lm} = \sum_{\nu_+, \nu_-, c_3} x_-^{\nu_-} x_+^{\nu_+} x_3^{c_3} \quad (3.2.41)$$

Az egész mindjárt érthetőbb, ha polárkoordinátákban írjuk fel:

$$x_\pm = r \sin \theta e^{\pm i\phi} \quad (3.2.42)$$

$$x_3 = r \cos \theta \quad (3.2.43)$$

Ezért:

$$\hat{L}_3 x_+ = \hbar x_+ \quad (3.2.44)$$

$$\hat{L}_3 x_- = -\hbar x_- \quad (3.2.45)$$

Innen:

$$\hat{L}_3(r^l Y_l^m) \rightarrow \hat{L}_3(x_-^{\nu_-} x_+^{\nu_+} x_3^{c_3}) = \hbar \underbrace{(\nu_+ - \nu_-)}_m (x_-^{\nu_-} x_+^{\nu_+} x_3^{c_3}) \quad (3.2.46)$$

$$m = \nu_+ - \nu_- \quad (3.2.47)$$

Ez megszorítja, hogy  $m$  csak  $-l$  és  $l$  között lehet. Ha ezek után megmondom  $l$ -et és  $m$ -et az rögzíteni fogja  $Y$  függvényeket? Vagy esetleg van még egy csomó másik paraméter, amittől függhet?

Ennek vizsgálatához fixáljuk le  $l$ -et!

$$\left. \begin{aligned} \nu_+ & l + 1 \text{ féle lehet} \\ \nu_- & l - \nu_+ + 1 \text{ féle lehet} \\ c_3 & \text{ már egyértelmű} \end{aligned} \right\} \text{összesen } \frac{1}{2}(l+1)(l+2) \text{ lehetőség} \quad (3.2.48)$$

$\Delta$  2-vel csökkenti a polinom fokát! Azaz már csak  $\frac{1}{2}(l-1)l$  lehetőség van, de ezt már lerögzíti  $\Delta$ . A független elemek száma  $\frac{1}{2}(l+1)(l+2) - \frac{1}{2}l(l-1)$ . Tehát a független  $Y$ -ok száma:  $2l+1$ . Pont ennyiféleképpen lehet  $m$ -et megválasztani. Könnyen sejthető, hogyha  $m$ -et is lerögzítjük, akkor már megadtam egyértelműen az  $Y$ -t.

Konstruáljuk meg a függvényeket!

$$Y_l^m(\theta, \phi) = P_l^m(\theta)e^{\pm m\phi} \quad (3.2.49)$$

$P_l^m(\cos \theta)$  - asszociált Legendre-polinomok. Ezeket a következő differenciálegyenlet megoldásaként definiáljuk:

$$-\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{dP}{d\theta} \right) + \frac{m^2}{\sin^2 \theta} P = (l+1)lP \quad (3.2.50)$$

Konstruáljunk meg az első néhány  $Y$  gömbfüggvényt:

$$\begin{aligned} l=0 & \quad \nu_+ = \nu_- = c_3 = 0 \quad m=0 \\ Y_{00} &= \text{const} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ l=1 & \quad m = -1, 0, 1 \\ Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad Y_{11} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \quad Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi} \end{aligned} \quad (3.2.51)$$

-  $Y_{lm}$  függvények ortonormált bázist alkotnak a csak szögektől függő függvények terén.  $\int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$

- Ha  $x_i$ -t lecseréljük  $-x_i$ -re, akkor  $Y_{lm} \rightarrow (-1)^l Y_{lm}$ .  $l$ -től függ a paritásuk.

### 3.2.2. A hidrogénatom

A hidrogén atom problémát szokásosan a potenciál definiálja. Egy darab - mozdulatlan -  $+Z \cdot e$  töltésű mag Coulomb-potenciáljában mozog egy elektron.

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (3.2.52)$$

Ezzel együtt a Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \left( -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) U(r) = EU(r) \quad (3.2.53)$$

Jöhet a szokásos  $k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$ .

$$\frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \left( -\frac{2mZe^2}{r\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) U(r) = -k^2 U(r) \quad (3.2.54)$$

Változócsere:  $\rho = k \cdot r$ .

$$-\frac{d^2 U(r)}{d\rho^2} + \left( -\frac{\alpha}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) U(r) = -U(r) \quad \alpha = \frac{2mZe^2}{k\hbar^2} \quad (3.2.55)$$

Határfeltételeink közé tartozik, hogy  $U(r)$ -nek úgy kell viselkednie, hogy  $U(r \rightarrow 0) \sim r^{l+1}$ .

Vizsgáljuk meg a 3.2.55 egyenletet  $r \rightarrow \infty$  határesetben:

$$-\frac{d^2U(\rho)}{d\rho^2} = -U(\rho) \quad U'' = -U \quad (3.2.56)$$

Ezt viszonylag egyszerűen megoldhatjuk:

$$U = Ae^{-\rho} + Be^{\rho} \quad (3.2.57)$$

$B$ -nek nullának kell lennie, különben a hullámfüggvényünk nem lesz normálható, szóval  $U \sim e^{-\rho}$ . Érdemes ezt a két, aszimptotikus megoldást leválasztani. A maradék legyen egy  $F(\rho)$  függvény!

$$U(\rho) = F(\rho)\rho^{l+1}e^{-\rho} \quad (3.2.58)$$

$$U'(\rho) = F'(\rho)\rho^{l+1}e^{-\rho} + (l+1)F(\rho)\rho^l e^{-\rho} - \rho F(\rho)\rho^{l+1}e^{-\rho} \quad (3.2.59)$$

$$U''(\rho) = \rho^{l+1}e^{-\rho} \left[ \left(1 + \frac{2(l+1)}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) F(\rho) + \left(-2 + \frac{2(l+1)}{\rho}\right) F'(\rho) + F''(\rho) \right] \quad (3.2.60)$$

Ezt visszaírva a Schrödinger-egyenletbe  $\rho^{l+1}$ ,  $e^{\rho^{l+1}}$  és  $l(l+1)$  kiesik (ezért csináltuk).

$$\frac{d^2F}{d\rho^2} - 2 \left(1 - \frac{l+1}{\rho}\right) \frac{dF}{d\rho} + \frac{\alpha - 2l - 2}{\rho} F = 0 \quad (3.2.61)$$

Keressük a megoldást sor alakban:

$$F(\rho) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i \rho^i \quad (3.2.62)$$

$$\sum_{j=0}^{\infty} a_j \left[ j(j-1)\rho^{j-2} - 2 \left(1 - \frac{l+1}{\rho}\right) j\rho^{j-1} + \frac{\alpha - 2l - 2}{\rho} \rho^j \right] = 0 \quad (3.2.63)$$

$$\sum_{j=0}^{\infty} a_j \left[ j(j-1)\rho^{j-2} + 2(l+1)j\rho^{j-2} - 2j\rho^{j-1} + \frac{\alpha - 2l - 2}{\rho} \rho^{j-1} \right] = 0 \quad (3.2.64)$$

Ez nem nagyon ad rekurzív formulát  $a_j$ -re, de mivel az első két tag amúgy is nulla, ezért indítsuk onnan:  $j \rightarrow j+1$ :

$$\sum_j = \rho^{j+1} [a_{j+1} ((j+1)j + 2(l+1)(j+1)) + a_j(\alpha - 2l - 2j)] = 0 \quad (3.2.65)$$

Ennek igaznak kell lennie minden  $\rho$ -ra, így:

$$a_{j+1} ((j+1)j + 2(l+1)(j+1)) = a_j(2l + 2j - \alpha) \quad (3.2.66)$$

Innen megvan a rekurziónk:

$$a_{j+1} = a_j \frac{2(l+j+1) - \alpha}{(j+1)(j+2l+2)} \quad (3.2.67)$$

Ezt még vizsgálni kell nagy  $j$ -kre:

$$\text{Tegyük fel, hogy } a_j \neq 0 \text{ minden } j\text{-re} \rightarrow a_{j+1} \sim \frac{2}{j} a_j \quad (3.2.68)$$

Azaz:

$$a_{j+1} \sim \frac{2^j}{j!} \cdot \text{const} \quad (3.2.69)$$

$$F(\rho) = C \cdot \sum_j \frac{2^j}{j!} \rho^j = C \cdot \sum_j \frac{(2\rho)^j}{j!} = C \cdot e^{2\rho} \quad (3.2.70)$$

Megint az a probléma, hogyha ezt az eredményt visszaírjuk  $U(\rho) = F(\rho)e^{-\rho}\rho^{l+1}$ , ami viszont  $\sim e^\rho$ . Ezt pedig már kinulláztuk, mert nem normálható tőle a hullámfüggvény. Mivel lehet ezt az ellentmondást feloldani? Egyszerűen nem lehet  $j$  akármekkora, valahol végeszakad. Legyen ennek a szakadásnak a helye  $n$ .

$$2 \underbrace{(l+j+1)}_n - \alpha = 0 \quad \text{valamely } j\text{-re} \quad (3.2.71)$$

Ebből az következik, hogy  $\alpha = 2n$ , ahol  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Ezt nevezzük fő kvantumszám-nak.

$$2n = \frac{2mZe^2}{\hbar^2 k^2} \rightarrow k_n = \frac{mZe^2}{\hbar^2} \frac{1}{n^2} = \frac{1}{na} \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad \text{Bohr-sugár} \quad (3.2.72)$$

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m} k^2 = -q \frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (3.2.73)$$

$n = l + j + 1$ ,  $n \geq l + 1$ . Fix  $n$ -re  $l$  értékei 0-tól  $n - 1$ -ig mehetnek. Adott  $l$ -hez ez  $m = -l, \dots, +l$ , azaz  $2l + 1$  lehetőség. Adott  $n$ -hez pedig ezt kell kiösszegezni, vagyis  $n^2$  lehetőség.

Azaz  $E_n$  csak  $n$ -től függ és  $n^2$ -szeresen degenerált.

Példák a jelölésekre:

$$- n = 1 \quad \quad \quad l = 0, \quad m = 0, \quad 1s \quad (3.2.74)$$

$$- n = 2 \quad \quad \quad \begin{array}{l} l = 0, \quad m = 0, \quad 2s \\ l = 1, \quad m = -1, 0, -1, \quad 2p \end{array} \quad (3.2.75)$$

$$- n = 3 \quad \quad \quad \begin{array}{l} l = 0, \quad m = 0, \quad 3s \\ l = 1, \quad m = -1, 0, -1, \quad 3p \\ l = 2, \quad m = -2, -1, 0, 1, 2, \quad 3d \end{array} \quad (3.2.76)$$

Minden állapot 3 db kvantumszámmal jellemezhető:

- főkvantumszám ( $n$ )
- mellékvantumszám ( $l$ )

– mágneses kvantumszám ( $m$ )

$F(\rho)$  egy véges polinom, neve Leguere-polinomok.

Most már mindent tudunk, a hidrogén atom hullámfüggvénye:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = F(\rho)e^{-\rho}\rho^{l+1}Y_l^m(\theta, \phi) \quad (3.2.77)$$

A hidrogén atom a valóságban természetesen nem ilyen. Több hibát is elkövettünk a számolás során, ezek közül az egyik az, hogy a központi magot állónak, rögzítettnek tekintettük.

Ez sem volt egy rossz közelítés, a következő lépés az, hogy a magot is bele vesszük a mozgásba.

### 3.2.3. Két test probléma

Egy darab proton és egy darab elektron, melyek között  $V(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) \sim \frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|^2}$  potenciál hat.

A Hamilton-operátor:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\hat{p}_p^2}{2m_p} + V(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p) \quad (3.2.78)$$

$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p, t)$ . Az interpretáció ugyanaz:  $|\Psi|^2 d^3x = dP$  ez annak a valószínűsége, hogy az elektron az  $\mathbf{r}_e$  és  $\mathbf{r}_e + d\mathbf{r}_e$  között van és a proton az  $\mathbf{r}_p$  és  $\mathbf{r}_p + d\mathbf{r}_p$  között van.

$$\hat{p}_e = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}_e} \quad p_{e_i} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_{e_i}} \quad (3.2.79)$$

$$\hat{p}_p = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}_p} \quad p_{p_i} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_{p_i}} \quad (3.2.80)$$

$$(3.2.81)$$

A Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \nabla_{\mathbf{r}_e}^2 + \nabla_{\mathbf{r}_p}^2 \right] \Psi + V(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p)\Psi = E\Psi \quad (3.2.82)$$

Klasszikus fizikai megfontolásokat követünk. Vezessük be a redukált tömeget, illetve a tömegközéppont helyét, mint új koordinátát.

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \quad (3.2.83)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e \quad (3.2.84)$$

$$\mathbf{R} = \frac{m_e \mathbf{r}_e + m_p \mathbf{r}_p}{m_e + m_p} \quad (3.2.85)$$

$$\hat{p} = \mu \left( \frac{\hat{\mathbf{P}}_e}{m_e} - \frac{\hat{\mathbf{P}}_p}{m_p} \right) \quad (3.2.86)$$

$$\hat{P} = \hat{p}_e - \hat{p}_p \quad (3.2.87)$$

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}} \quad (3.2.88)$$

$$\hat{P} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{R}} \quad (3.2.89)$$

$$(3.2.90)$$



Ezzel felírva a Hamilton-operátort:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{e\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \frac{\hbar^2}{2(m_e + m_p)} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + V(\mathbf{r}) \quad (3.2.91)$$

Keressük a megoldást a következő alakban:

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \Psi(\mathbf{r})_1 \Psi(\mathbf{R})_2 \quad (3.2.92)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \Psi_1 \Psi_2 - \frac{\hbar^2}{2(m_e + m_p)} \Psi_1 \Delta \Psi_2 + V \Psi_1 \Psi_2 = E \Psi_1 \Psi_2 \quad (3.2.93)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\Delta \Psi_1}{\Psi_1} - \frac{\hbar^2}{2(m_e + m_p)} \frac{\Delta \Psi_2}{\Psi_2} + V = E \quad (3.2.94)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\Delta \Psi_1}{\Psi_1} + V - E = \frac{\hbar^2}{2(m_e + m_p)} \frac{\Delta \Psi_2}{\Psi_2} \quad (3.2.95)$$

Mindkét oldalnak külön-külön konstansnak kell lennie:  $-E_{TKP}$ !

$$1) \quad -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \Psi_1 + V \Psi_1 = (E - E_{TKP}) \Psi_1 = \varepsilon \Psi_1 \quad (3.2.96)$$

$$2) \quad -\frac{\hbar^2}{2(m_e + m_p)} \Delta \Psi_2 = E_{TKP} \Psi_2 \quad (3.2.97)$$

2) egyenlet egy sima szabad részecske mozgása. Ennek a megoldása síkhullám:

$$\Psi_2(\mathbf{R}) = e^{i\frac{\mathbf{p}\mathbf{R}}{\hbar}} \quad E_{TKP} = \frac{\mathbf{p}^2}{2(m_e + m_p)} \quad (3.2.98)$$

1) egyenlet egy centrális potenciális Schrödinger-egyenlet:

$$\varepsilon_n \sim \frac{1}{n^2} \mu \quad (3.2.99)$$

Tehát a rendszer teljes energiája:

$$E = E_{TKP} + \varepsilon = -\frac{Z^2 e^4 \mu}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} + \frac{\mathbf{p}^2}{2(m_e + m_p)} \quad (3.2.100)$$

## 4. Axiomatikus kvantummechanika

Eddig egy hullámfüggvényt kerestünk, aminek az abszolútérték-négyzete bírt fizikai tartalommal: az adta a térbeli eloszlást. Most valami általánosabb leírás után nyomozunk.

A következő tárgyalás nagy része Diractól és Neumanntól származik.

## 4.1. I. axióma

A fizikai állapotokat egy  $\mathcal{H}$  Hilbert-tér elemei írják le. Minden fizikai rendszerhez rendelhető egy komplex Hilbert-tér és minden fizikai állapot egy vektor ebben a térben.

$\mathcal{H}$  egy vektor tér, azaz:

$$- \Psi_1, \Psi_2 \in \mathcal{H} \rightarrow \alpha \Theta_\infty + \beta \Theta_\epsilon \in \mathcal{H}$$

$$- \Psi + 0 = \Psi$$

- Értelmes benne egy skaláris szorzás:

$$\Psi_1 \otimes \Psi_2 \rightarrow (\Psi_1, \Psi_2) \in \mathbb{C}$$

Amely második tagjában lineáris:

$$(\Psi_1, \alpha \Psi_2 + \beta \Psi_3) = \alpha (\Psi_1, \Psi_2) + \beta (\Psi_1, \Psi_3) \quad (4.1.1)$$

$$(\alpha \Psi_1 + \beta \Psi_2, \Psi_3) = \alpha^* (\Psi_1, \Psi_3) + \beta^* (\Psi_2, \Psi_3) \quad (4.1.2)$$

$\Psi_1, \Psi_2$  akkor független egymástól, ha minden lineárkombinációjuk, amely nem triviális az nem nulla. Speciálisan, ha  $\Psi_i$ -k ortogonálisak, vagyis  $(\Psi_i, \Psi_j) = 0$ , ha  $i \neq j$ , akkor ezek függetlenek. Ez visszefele nem feltétlenül igaz, de lehet ortogonalizálni.

Egy  $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots, \Psi_n$  rendszer teljes, ha  $\Psi \in \mathcal{H}$  felírható ezek lineárkombinációjaként.

Ha egy ilyen  $\Psi_i$  rendszer ortogonális és teljes, akkor az egy bázis a  $\underline{H}$ -en. A bázisban lévő vektorok száma adja meg, hogy a Hilbert-tér hány dimenziós. Ha dimenzió szám véges, akkor a bázis egyértelmű.

Ha végtelen dimenziós a Hilbert-tér, akkor a teljességet úgy értelmezzük, hogy létezik  $\Phi_i$  bázis úgy, hogy minden  $\Psi \in \mathcal{H}$  kifejthető:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N \alpha_i \Phi_i = \Psi \quad (4.1.3)$$

Válasszunk egy ilyen  $\Phi_i$  bázist. Mik lesznek az együtthatók?

$$\Psi = \sum_{i=1}^N \alpha_i \Phi_i \quad (4.1.4)$$

$$(\Phi_j, \Psi) = \sum_{i=1}^N \alpha_i \underbrace{(\Phi_i, \Phi_j)}_{\delta_{ij}} = \alpha_j (\Phi_j, \Phi_j) \quad (4.1.5)$$

$$\alpha_j = \frac{(\Phi_j, \Psi)}{(\Phi_j, \Phi_j)} \quad (4.1.6)$$

Ha  $\Psi = \sum_i \alpha_i \Phi_i$  és  $\Psi' = \sum_i \alpha'_i \Phi_i$ , akkor

$$(\Psi, \Psi') = (\alpha_i \Psi_i, \alpha'_j \Psi_j) = \sum_{ij} \alpha_i^* \alpha'_j (\Psi_j, \Psi_i) = \sum_i \frac{(\Phi_i, \Psi)^* (\Phi_i, \Psi')}{(\Phi_i, \Phi_i)} \quad (4.1.7)$$

Ez segít a skalárszorzatnak interpretációt adni:

$\Phi_i$  teljes ortogonális bázis azt azonosítjuk egy mérés utáni lehetséges kimenetellel. Egy  $\Psi$  állapotban lévő rendszer esetén annak a valószínűsége, hogy a mérés után  $\Phi_i$  állapotba kerül a rendszer:

$$P(\Psi \rightarrow \Phi_i) = \frac{|(\Phi_i, \Psi)|^2}{(\Psi, \Psi)(\Phi_i, \Phi_i)} \geq 0 \quad (4.1.8)$$

$$\sum_i P(\Psi \rightarrow \Phi_i) = \frac{1}{(\Psi, \Psi)} \sum_i \frac{|(\Phi_i, \Psi)|^2}{(\Phi_i, \Phi_i)} = 1 \quad (4.1.9)$$

Vegyük észre, hogy a valószínűség nem függ attól, ha a kifejezéseket átnormalom.  $\Psi$  és  $\alpha\Psi$  ugyanazt a fizikai állapotokat írják le. Ezért célszerű minden vektort egyre normalni. Ekkor  $(\Psi, \Psi) = (\Phi_i, \Phi_i) = 1$ .

$$P(\Psi \rightarrow \Phi_i) = |(\Phi_i, \Psi)|^2 \quad (4.1.10)$$

De egy egységnyi abszolútértékű komplex számmal még szorozható.

Ezt a halmazt, hogy  $\{\Psi' | \Psi' = e^{i\phi}\Psi, (\Psi, \Psi) = 1\}$  sugárnak nevezzük a Hilbert-téren.

Ezzel az első axiómát átfogalmazhatjuk. Minden fizikai rendszerhez rendelhető egy Hilbert-tér és minden fizikai állapot egy sugár, ezen a Hilbert-téren.

#### 4.1.1. Dirac jelölés

Állapotok:  $|\Psi\rangle$ , skalárszorzat:  $(\Psi_1, \Psi_2) = \langle\Psi_1|\Psi_2\rangle$ .

Sok esetben  $\Psi$ -t jellemzi egyértelműen egy-egy szám. Ilyenkor az állapotokat a számokkal jelöljük, például  $|\Psi\rangle = |l, m, n\rangle$ .

Vannak olyan esetek, mikor egy mérés kimenetele folytonos lehet, például a koordináta. Ilyenkor:  $\Phi_i \rightarrow \Phi_\alpha$ . Ekkor a normálás:  $(\Phi_\alpha, \Phi_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$ . Kifejtés:

$$\Psi = \int d\alpha \beta_\alpha \Phi_\alpha \quad \beta_\alpha = (\Psi, \Phi_\alpha) = \int d\alpha' \beta_{\alpha'}^* \beta_{\alpha'} \quad (4.1.11)$$

Valószínűség:

$$dP(\Psi \rightarrow \Phi_\alpha) = |(\Phi_\alpha, \Psi)|^2 d\alpha \quad (4.1.12)$$

Például a helymérés lehetséges kimenetele:  $\Phi_x \in \mathcal{H}$ :

$$\Psi(x) = (\Phi_x, \Psi) \quad (4.1.13)$$

ez a szokásos hullámfüggvény.

## 4.2. II. Axióma

Hogyan tudjuk magát a fizikai mennyiséget ábrázolni? Minden fizikai mennyiség hermitikus operátorral reprezentálható.

Az operátorokba már beleértjük, hogy lineárisak. Az operátorok olyan leképezések: hogy  $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$

– Szorzás:

$$\hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{A}(\hat{B}\Psi) \quad (4.2.1)$$

– Skalárral való szorzás:

$$(\alpha\hat{A})\Psi = \alpha(\hat{A}\Psi) \quad (4.2.2)$$

– Összeadás:

$$(\hat{A} + \hat{B})\Psi = \hat{A}\Psi + \hat{B}\Psi \quad (4.2.3)$$

– Adjungáltja:

$$(\Psi_1, \hat{A}\Psi_2) = (\hat{A}^+\Psi_1, \Psi_2) \quad (4.2.4)$$

$$(\hat{A}^+)^+ = \hat{A} \quad (4.2.5)$$

$$(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{A}^+\hat{B}^+ \quad (4.2.6)$$

Egy operátor önadjungált, ha  $\hat{A}^+ = \hat{A}$

– Mátrixelemek: Legyen  $\Phi_i$  egy ortonormált bázis

$$A_{ij} = (\Phi_i, \hat{A}\Phi_j) \quad (4.2.7)$$

Innen már látható, hogy a mátrixszorzás szokásos szabályai érvényesek. Persze a mátrixelemek függnek a bázis megválasztásától.

Egy  $\Psi$  állapot akkor hordozza a mennyiségnek egy határozott  $a$  állapotát, ha  $\hat{A}\Psi = a\Psi$ , vagyis  $\Psi$  sajátfüggvény  $a$  a sajátérték.

Mivel  $\hat{A}$  hermitikus, sajátértékei valósak, sajátfüggvényei ortogonálisak. De legalábbis ortogonalizálható degeneráció esetén. Mátrix nyelven:

$$\Psi_j = (\Phi_j, \Psi) \quad (4.2.8)$$

$$(\hat{A}\Psi)_i = \sum_j A_{ij}\Psi_j = \sum_j A_{ij}(\Phi_j, \Psi) = a(\Phi_j, \Psi) \quad (4.2.9)$$

Illetve:

$$\int d\xi A_{\xi'\xi}(\Phi_\xi, \Psi) = a(\Phi_{\xi'}, \Psi) \quad (4.2.10)$$

$$\hat{A} \text{ sajátvektorai } \hat{A}\Psi_i = a_i\Psi_i \rightarrow (\Psi_i, \Psi_j) = \delta_{ij} \quad (4.2.11)$$

Illetve folytonos esetben:

$$\hat{A}\Psi_\xi = a_\xi\Psi_\xi \rightarrow (\Psi_\xi, \Psi_{\xi'}) = \delta(\xi - \xi') \quad (4.2.12)$$

Legyen  $\Psi \in \mathcal{H}$  tetszőleges állapot és  $\hat{A}$  egy fizikai mennyiség,  $a_i$  sajátértékekkel. Annak a valószínűsége, hogy egy mérés után a rendszer  $\Phi_i$  állapotba kerül:

$$P(\Psi \rightarrow \Phi_i) = |(\Phi_i, \Psi)|^2 \quad (4.2.13)$$

Vagyis  $a_i$  mérés valószínűsége:  $|(\Phi_i, \Psi)|^2$ .

### 4.3. Várható értékek

$$\langle \hat{A} \rangle_{\Psi} = \sum_i a_i P(\Psi \rightarrow \Phi_i) = \sum_i a_i |(\Phi_i, \Psi)|^2 = \sum_i a_i (\Phi_i, \Psi)^* (\Phi_i, \Psi) = (\Psi, \hat{A} \Psi) \quad (4.3.1)$$

Dirac-féle jelölésben:

$$\langle \hat{A} \rangle_{\Psi} = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle \quad (4.3.2)$$

#### 4.3.1. Függvények

$$\hat{A} \Phi = a \Phi \quad \rightarrow \quad \hat{A}^n \Phi = a^n \Phi \quad (4.3.3)$$

Analitikus  $f$  függvényekre:

$$f(\hat{A}) \Phi = f(a) \Phi \quad (4.3.4)$$

Általános  $\Psi$ -re:

$$\Psi = \sum_n c_n \Phi_n \quad \hat{A} \Phi_n = a_n \Phi_n \quad (4.3.5)$$

Definíció szerint:

$$f(\hat{A}) \Psi = \sum_n c_n f(a_n) \Phi_n \quad (4.3.6)$$

Általában:

$$\langle f(\hat{A}) \rangle_{\Psi} \neq f(\langle \hat{A} \rangle_{\Psi}) \quad (4.3.7)$$

melyre a legtipikusabb példa:  $\langle \hat{A}^2 \rangle_{\Psi} \neq \langle \hat{A} \rangle_{\Psi}^2$

#### 4.3.2. Határozatlansági reláció

Egy  $\mathcal{H}$  Hilbert-téren igaz a Cauchy-Schwartz-egyenlőtlenség, mely szerint minden  $\Psi, \Psi' \in \mathcal{H}$  vektorra igaz, hogy:

$$|(\Psi, \Psi')|^2 \leq (\Psi, \Psi)(\Psi', \Psi') \quad (4.3.8)$$

Ha nekem van egy  $\hat{A}$  mérhető mennyiségem, akkor értelmes annak a szórása:

$$\Delta_{\Psi} \hat{A} = \sqrt{\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_{\Psi})^2 \rangle_{\Psi}} \quad (4.3.9)$$

Ez akkor igaz, ha  $|\Psi|^2 = 1$ .

Kettő tetszőleges operátorra alkalmazzuk (4.3.8) egyenlőtlenséget!

$$\Delta_{\Psi} \hat{A} \Delta_{\Psi} \hat{B} \geq \frac{1}{2} \left| (\Psi, [\hat{A}, \hat{B}] \Psi) \right| \quad (4.3.10)$$

Ha a két operátor egymással kommutál, akkor van közös sajátvektor-rendszerük, tehát tud a két szórás egyszerre nulla lenni. Egyébként a két mennyiség nem mérhet egyszerre.

Nagyon híres példa: legyen  $\hat{A} = \hat{x}$  és  $\hat{B} = \hat{p}$ :

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \mathbf{I} \quad \rightarrow \quad \Delta_{\Psi} \hat{x} \Delta_{\Psi} \hat{p} \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (4.3.11)$$

## 4.4. Operátorok spúrja

Legyen  $\Phi_i$  egy ortonormált bázis. Ekkor:

$$\text{Sp}\hat{A} = \sum_i (\Phi_i, \hat{A}\Phi_i) = \sum_i \langle \Phi_i | \hat{A} | \Phi_i \rangle \quad (4.4.1)$$

Ennek az értéke bázisfüggetlen.

Tulajdonságai:

- $\text{Sp}(\alpha\hat{A} + \beta\hat{B}) = \alpha\text{Sp}\hat{A} + \beta\text{Sp}\hat{B}$
- $\text{Sp}\hat{A}^+ = (\text{Sp}\hat{A})^*$
- $\text{Sp}(\hat{A}_1\hat{A}_2)\hat{A}_3\dots\hat{A}_n$  ez permutációfüggetlen
- Ha a sajátértéke  $a_i \rightarrow \text{Sp}\hat{A} = \sum_i a_i$

Nem minden operátornak van spúrja, például:

$$\text{Sp}\mathbf{I} = \sum_i^d 1 = d \quad (4.4.2)$$

Ennek végtelen dimenziós Hilbert-tereken nincs értelme.

Azonban, ha  $d$  véges, akkor:

$$\text{Sp}[\hat{x}, \hat{p}] = \text{Sp}\hat{x}\hat{p} - \text{Sp}\hat{p}\hat{x} = 0 \quad (4.4.3)$$

## 4.5. Diád

Állapotokból is tudunk operátorokat felépíteni:

$$[\Psi\Phi^+] \xrightarrow{\text{Dirac jelölésével}} |\Psi\rangle \langle\Phi| \quad (4.5.1)$$

Ennek a hatását a következő képen kell értelmezni:

$$[\Psi\Phi^+]\chi = \Psi(\Phi, \chi) \quad (4.5.2)$$

Két diád szorzata is diád lesz:

$$|\Psi_1\rangle \langle\Psi_2| \cdot |\Psi_3\rangle \langle\Psi_4| = \overbrace{\langle\Psi_2| |\Psi_3\rangle}^{szm} \cdot \overbrace{|\Psi_1\rangle \langle\Psi_4|}^{did} \quad (4.5.3)$$

Leggyakrabban a két vektor egyenlő egymással. Ilyenkor:

$$|\Phi\rangle \langle\Phi| = [\Phi\Phi] \quad |(\Phi, \Phi)|^2 = 1 \quad (4.5.4)$$

$$(|\Phi\rangle \langle\Phi|)^2 = |\Phi\rangle \langle\Phi| \quad (4.5.5)$$

ez egy projektor, ami annyit tesz, hogy minden tetszőleges állapotot  $\Phi$ -re vetít. Tehát akármilyen  $\Psi$  állapotra a hatása:

$$|\Phi\rangle \langle\Phi| \langle\Psi| = \langle\Phi| |\Psi\rangle \langle\Phi| \quad (4.5.6)$$

Ha  $\Phi_i$ -k teljes ortonormált rendszert alkotnak, akkor:

$$\sum_i |\Phi_i\rangle \langle \Phi_i| \Psi = \sum_i c_i \langle \Phi_i| = \Psi \quad (4.5.7)$$

Amiből következik, hogy  $|\Phi_i\rangle \langle \Phi_i| = 1$ .

Hasonlóan, ha  $\Phi_i \hat{A}$  sajátvektor-rendszere:

$$\hat{A} \Phi_i = a_i \Phi_i \quad \sum_i a_i |\Phi_i\rangle \langle \Phi_i| \Psi = \quad (4.5.8)$$

$$= \sum_i a_i c_i \langle \Phi_i| = \sum_i c_i \hat{A} \langle \Phi_i| = \hat{A} \sum_i c_i \langle \Phi_i| = \hat{A} \Psi \quad (4.5.9)$$

Ebből kiszedhetjük egy operátor projektorfelbontását:

$$\hat{A} = \sum_i a_i |\Phi_i\rangle \langle \Phi_i| \quad (4.5.10)$$

Ezzel felírható egy tetszőleges függvény hatása az operátorra:

$$f(\hat{A}) = \sum_i f(a_i) |\Phi_i\rangle \langle \Phi_i| \quad (4.5.11)$$

## 4.6. Sűrűség operátor

A kvantummechanika csak statisztikus eredményt tud szolgáltatni bizonyos esetekben, például, ha nem ismerjük a rendszer állapotát (sokrészecske rendszerekben tipikusan ez a helyzet). Csak annyit tudunk, hogy mik a lehetséges állapotai,  $|\Psi_n\rangle$  állapotban van  $p_n$  valószínűséggel.

Az ilyen állapotokat nevezzük kevert állapotoknak. Ekkor lehet definiálni egy operátort (Neumann):

$$\hat{\rho} = \sum_n p_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n| \quad \sum_n p_n = 1 \quad (4.6.1)$$

$\rho$  minden mérésekkel kimérhető információt tartalmaz a rendszerről. Annak a valószínűsége, hogy a mérés után  $\Phi_i$  állapota kerül a rendszer:

$$P(\rho \rightarrow \Phi_i) = \sum_n p_n |\langle \Phi_i | \Psi_n \rangle|^2 = \sum_n p_n |\Phi_i\rangle \langle \Psi_n| \langle \Psi_n| \langle \Phi_i| = \langle \Phi | \hat{\rho} | \Phi \rangle \quad (4.6.2)$$

Ha  $\Phi_i$  éppen valamilyen  $\hat{A}$  fizikai mennyiségnek sajátrendszere  $a_i$  sajátértékekkel:

$$\langle \hat{A} \rangle_\rho = \sum_{i,n} a_i p_n |\langle \Phi_i | \Psi_n \rangle|^2 = \sum_{i,n} a_i p_n \langle \Psi_n | \Phi_i \rangle \langle \Phi_i | \Psi_n \rangle = \sum_{i,n} p_n \langle \Phi_i | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \hat{A} \Phi_i \rangle = \quad (4.6.3)$$

$$= \sum_i \left\langle \Phi_i \left| \sum_n p_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n| \hat{A} \Phi_i \right. \right\rangle = \text{Sp} \hat{\rho} \hat{A} \quad (4.6.4)$$

$$(4.6.5)$$

$\hat{\rho}$  sokféleképpen előállítható, így visszafelé ezt nem tudom megcsinálni.  $\hat{\rho}$  egy hermitikus operátor, azaz van neki ortogonális rendszere. Legyen  $\Phi_i$  az a rendszer. Azaz:

$$\hat{\rho}\Phi_i = \rho_i\Phi_i \rightarrow \hat{\rho} = \sum_n \rho_n |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n| \quad (4.6.6)$$

$$P(\hat{\rho} \rightarrow \Phi_i) = \langle \Phi_i | \hat{\rho} | \Phi_i \rangle \geq 0 \quad (4.6.7)$$

Ha ilyen tud egy operátor, akkor az egy pozitív szemidefinit operátor, azaz az összes sajátértéke pozitív.

$$\sum_i P(\hat{\rho} \rightarrow \Phi_i) = 1 = \text{Sp}\hat{\rho} \quad (4.6.8)$$

Hogy néz ki  $\rho$ , ha ismerem a rendszer pontos állapotait?

Tiszta állapotok:  $\Psi: \hat{\rho} = |\Psi\rangle \langle \Psi|$  ennek van egy valószínűsége, az összes többi nulla. Mik a sajátértékek? Diagonalizálható! Ha olyan bázist választok, ahol  $\Psi$  a bázisvektor, akkor a sűrűségoperátor első eleme egy a többi mind nulla!

#### 4.6.1. Neumann-entrópia

A tiszta állapotoktól való "távolságot" méri:

$$S[\rho] = -k_B \text{Sp}(\rho \ln \rho) = -k_B \sum_i \rho_i \ln \rho_i \quad (4.6.9)$$

Tiszta állapotokra ez valóban zérus.

### 4.7. Szimmetriák

A kvantummechanika második posztulátuma azt mondja ki, hogy mérhető fizikai mennyiségek csak hermitikus operátorok lehetnek. Honnan szerezzünk ilyen operátorokat? Kétféleképpen lehet eljárni.

Az egyik út, ha vesszük a klasszikus mechanika rendszereit és megkeressük azok kvantum megfelelőjét. Érezhető, hogy nem ez a természetesen eljárás. Azt várjuk, hogy a kvantummechanika közelítéseként kapjuk meg a klasszikus mechanikát és ne fordítva. Ettől eltekintve ez gyakran használt mód és nagyon hatékony.

Egy másik lehetőség, ha szimmetria elveket használunk és ez a fejezet erről a módszerről fog szólni.

A szimmetriák alapja a szimmetria elv: a fizika törvényei nem függenek a megfigyelőtől. A legtipikusabb példa: a berendezés eltolása, elforgatása nem befolyásolja a mérés eredményét.

Ilyen szimmetriatranszformációk:

- térbeli/időbeli eltolás
- térbeli elforgatás
- térbeli/időbeli tükrözés



A transzformáció után a mérés eredménye azonos lesz. Ez nem azt leneti, hogy a rendszert leíró  $\Psi$  állapot ne változna meg, hiszen  $\Psi$ -t nem lehet mérni, csak a várható értékeket, a mátrixelemeket.

Tehát megengedhetjük, hogy  $\Psi \rightarrow \Psi'$  és  $\Phi_i \rightarrow \Phi_i$  legyen. Csak azt várjuk el, hogy

$$|\langle \Phi_i | \Psi \rangle|^2 = |\langle \Phi_i | \Psi' \rangle|^2 = P(\Psi \rightarrow \Phi_i) \quad (4.7.1)$$

Ez legegyszerűbben úgy teljesülhet, ha a skalárszorzat nem változik meg.

Legyen tehát a transzformációnk az  $\hat{U}$  operátor. Ő azt tudja, hogy

$$\Psi' = \hat{U}\Psi \quad (4.7.2)$$

$$\Phi' = \hat{U}\Phi \quad (4.7.3)$$

azzal a feltétellel, hogy:

$$\left( \hat{U}\Phi, \hat{U}\Psi \right) = (\Phi, \Psi) \quad (4.7.4)$$

$$\left( \Phi, \hat{U}^+\Psi \right) = (\Phi, \Psi) \quad (4.7.5)$$

$$(4.7.6)$$

A feltétel persze csak abban az esetben teljesülhet, ha  $\hat{U}$  unitér operátor, azaz  $\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$ .

Fontos tulajdonsága még a szimmetriáknak, hogy invertálhatóak és van egy olyan transzformáció, ami egész egyszerűen nem csinál semmit. Ez az egységoperátor.

Ezek alapján a szimmetriákhoz tartozó operátorok csoportot alkotnak.

Ez vajon a legáltalánosabb dolog, amit csinálhatunk? A fizikai állapotok nem vektorok, hanem sugarak. Tehát a skalárszorzat-megmaradás nem igazán értelmes. A skalárszorzat nagyságának kell megmaradnia!

#### 4.7.1. Wigner-tétel

Csak két lehetőség van a szimmetriák ábrázolására:

- $\hat{U}$  unitér
- $\hat{U}$  antiunitér

Ha  $\hat{U}$  antiunitér, az azt jelenti, hogy:

$$\hat{U}(\alpha\Psi + \beta\Psi') = \alpha^*\hat{U}\Psi + \beta^*\hat{U}\Psi' \quad (4.7.7)$$

$$\left( \hat{U}\Phi, \hat{U}\Psi \right) = (\Phi, \Psi)^* \quad (4.7.8)$$

Az adjungáltság is mást jelent:

$$\left( \hat{U}\Phi, \Psi \right) = \left( \Phi, \hat{U}^+\Psi \right)^* \quad (4.7.9)$$

Tipikusan ábrázolásoknál az első valósul meg, másodikra legjobb példa az időtükrözés.

### 4.7.2. Folytonos szimmetriák

Ezen belül is azokkal foglalkozunk, amelyek az egységgel folytonos összeköttettségben vannak. Ilyenek a forgatások és az eltolások. Ha folytonos, akkor közel van az egyhez, linearizálható 1 környékén. Azaz:

$$\hat{U}_\varepsilon = \hat{I} + i\varepsilon\hat{T} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (4.7.10)$$

A kicsiség itt úgy jelenik meg, hogy  $\varepsilon \ll 1$ .

Az unicitás feltétele:

$$1 = \hat{U}_\varepsilon^+ \hat{U}_\varepsilon = \left(\hat{I} - i\varepsilon\hat{T}\right) \left(\hat{I} + i\varepsilon\hat{T}\right) = \hat{I} + i\varepsilon \left(\hat{T} - \hat{T}^+\right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (4.7.11)$$

Ez persze csak úgy lehetséges, ha  $\hat{T} - \hat{T}^+ = 0$ , azaz  $\hat{T}$  hermitikus, ami tipikusan fizikai mennyiség.

Ebből azt a következtetést vonjuk le, hogy minden folytonos szimmetriához létezik egy fizikai mennyiség. Innen már megtudjuk csinálni a transzformációt nagy paraméterértékekre is. Legyen  $\theta$  a transzformáció paramétere, mondjuk például egy szögparaméter. Ekkor  $\varepsilon = \theta/N$ , azaz  $N$ -szer egymás után hattanva  $\hat{U}_\varepsilon$ -t az  $\hat{U}(\theta)$ -t adja:

$$\hat{U}(\theta) = \underbrace{\hat{U}_\varepsilon \cdot \hat{U}_\varepsilon \cdot \hat{U}_\varepsilon \cdot \dots \cdot \hat{U}_\varepsilon}_{N\text{-szer egymás után}} \rightarrow \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \hat{I} + i \frac{\theta \hat{T}}{N} \right)^N = e^{i\theta \hat{T}} \quad (\text{lásd 4.3.1 szakasz}) \quad (4.7.12)$$

$\hat{T}$  a szimmetria generátora.

A transzformáció után a fizikai mennyiségek várható értéke megváltozhat. Legyen a fizikai mennyiségünk  $\hat{A}$

$$\left(\Psi, \hat{A}\Psi\right) = \left(\hat{U}\Psi, \hat{A}\hat{U}\Psi\right) = \left(\Psi, \hat{U}^+ \hat{A} \hat{U}\Psi\right) = \left(\Psi, \hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U}\Psi\right) \quad (4.7.13)$$

Vagyis a transzformáció olyan, mintha nem csináltam volna semmit, csak egyszerűen  $\hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U}$ -t mérném  $\Psi$ -n. Az ilyen típusú transzformációk nem változtatják meg az adott operátor algebrai tulajdonságait.

$$\left(\hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U}\right) \cdot \left(\hat{U}^{-1} \hat{B} \hat{U}\right) = \hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{B} \hat{U} \quad \text{és} \quad \hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U} + \hat{U}^{-1} \hat{B} \hat{U} = \hat{U}^{-1} \left(\hat{A} + \hat{B}\right) \hat{U} \quad (4.7.14)$$

$\hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U}$  sajátértékei ugyanazok, csak a sajátvektorok változnak:

$$\hat{A}\Psi = a\Psi \quad / \text{balról szorzunk } \hat{U}^{-1} \quad (4.7.15)$$

$$\left(\hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U}\right) \hat{U}^{-1} \Psi = a \hat{U}^{-1} \Psi \quad (4.7.16)$$

Mi lesz  $\hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U}$ , ha  $\hat{U}$  kicsi?

$$\hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U} = \left(\hat{I} - i\varepsilon\hat{T}\right) \hat{A} \left(\hat{I} + i\varepsilon\hat{T}\right) = \hat{A} - i\varepsilon \left[\hat{T}, \hat{A}\right] + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (4.7.17)$$

$$\hat{A} \rightarrow \hat{A} - i\varepsilon \left[\hat{T}, \hat{A}\right] \quad (4.7.18)$$

Ha  $\hat{T}$  és  $\hat{A}$  kommutál, akkor  $\hat{A}$  nem változik meg a transzformáció során. Ennek az egyik speciális esete, ha  $\hat{A}$  is egy generátor.

### 4.7.3. Térbeli eltolás

A részecskék rendszerét tudom jellemezni valamilyen  $\mathbf{x}_n$  helyvektorokkal. Ezeket a helyvektorokat eltoljuk valamilyen  $\mathbf{a}$  vektorral.  $\mathbf{x}_n \rightarrow \mathbf{x}_n + \mathbf{a}$ . Ehhez az előzőek alapján fog tartozni egy  $\hat{U}(\mathbf{a})$ . Mivel a helyvektor fizikai mennyiség, a következésképpen kell változnia:

$$\hat{U}^{-1}(\mathbf{a})\hat{\mathbf{x}}\hat{U}(\mathbf{a}) = \hat{\mathbf{x}} + \mathbf{a} \cdot \hat{I} \quad (4.7.19)$$

Legyen  $\mathbf{a}$  kicsi:

$$\hat{U} \approx \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \hat{\mathbf{p}} + \mathcal{O}(\mathbf{a}^2) \quad (4.7.20)$$

$\hat{\mathbf{p}}$ -t nevezzük impulzusnak!  $\hbar$  dimenzionális okokból lett belekeverve.

$$\left( \hat{I} + \frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \hat{\mathbf{p}} \right) \hat{\mathbf{x}}_n \left( \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \hat{\mathbf{p}} \right) = \hat{\mathbf{x}}_n + \mathbf{a} \hat{I} \quad (4.7.21)$$

$$\hat{\mathbf{x}}_n + i\mathbf{a} \left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}}{\hbar}, \hat{\mathbf{x}}_n \right] = \hat{\mathbf{x}}_n + \mathbf{a} \quad (4.7.22)$$

$$[\hat{\mathbf{p}}_i, \hat{\mathbf{x}}_{ni}] = i\hbar\delta_{ij} \quad (4.7.23)$$

$\hat{\mathbf{p}}$  minden koordinátával ugyanúgy kommutál, legyen  $\hat{\mathbf{P}}$  az összipulzus:

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_n \hat{\mathbf{p}} \quad (4.7.24)$$

$$[\hat{\mathbf{x}}_{ni}, \hat{\mathbf{p}}_{mj}] = 0 \quad n \neq m \quad (4.7.25)$$

$$[\hat{\mathbf{x}}_{ni}, \hat{\mathbf{p}}_{mj}] = i\hbar\delta_{nm}\delta_{ij} \quad (4.7.26)$$

Az eltolások kommutálnak egymással:

$$[\hat{U}(\mathbf{a}), \hat{U}(\mathbf{b})] = 0 \quad (4.7.27)$$

Ebből következik:

$$[\hat{\mathbf{P}}_i, \hat{\mathbf{P}}_j] = 0 \quad (4.7.28)$$

azaz létezik közös sajátvektorrendszer.  $\hat{U}(\mathbf{a}) = e^{-i\hat{\mathbf{P}}\mathbf{a}/\hbar}$ .

Legyen  $\Phi_{\mathbf{x}}$  az  $\mathbf{x}$ -hez tartozó koordináta sajátállapota.

Ekkor:

$$\hat{U}(\mathbf{x})\Phi_0 = \Phi_{\mathbf{x}} \quad (4.7.29)$$

illetve:

$$\hat{U}(\Delta\mathbf{x})\Phi_{\mathbf{x}} = \Phi_{\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}} \quad (4.7.30)$$

$$\left( 1 - \frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \hat{\Delta\mathbf{x}} \right) \Phi_{\mathbf{x}} = \Phi_{\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}} \quad (4.7.31)$$

$$-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{p}} \Delta\mathbf{x} \Phi_{\mathbf{x}} = \Phi_{\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}} - \Phi_{\mathbf{x}} \quad (4.7.32)$$

$$\hat{\mathbf{p}}_i = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \Phi_{\mathbf{x}} \quad (4.7.33)$$

Mintha hiányozna egy előjel, de persze ez nem a hullámfüggvény. A hullámfüggvény:

$$\Psi(x) = (\Phi_{\mathbf{x}}, \Psi) \quad (4.7.34)$$

$$\hat{\mathbf{p}}_i \Psi(x) = \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \Phi_{\mathbf{x}}, \Psi \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} (\Phi_{\mathbf{x}}, \Psi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \Psi(x_i) \quad (4.7.35)$$

Az eltolási szimmetria ábrázolása tehát:

$$\hat{U}(\mathbf{a}) = e^{-i\hat{\mathbf{P}}\mathbf{a}/\hbar} \quad (4.7.36)$$

$$\Phi_{\mathbf{x}} = \hat{U}(\mathbf{a})\Phi_0 = e^{-i\hat{\mathbf{P}}\mathbf{a}/\hbar}\Phi_0 \quad (4.7.37)$$

Legyenek az impulzus sajátállapotok  $\Psi_{\mathbf{p}}$ !

$$(\Psi_{\mathbf{p}}, \Phi_{\mathbf{x}}) = (\Psi_{\mathbf{p}}, e^{-i\hat{\mathbf{P}}\mathbf{a}/\hbar}\Phi_0) = (e^{-i\hat{\mathbf{P}}\mathbf{a}/\hbar}\Psi_{\mathbf{p}}, \Phi_0) \quad (4.7.38)$$

Ha  $\Psi_{\mathbf{p}}$ -ket megfelelően normáljuk, a faktor eltűnik!

$$(\Psi_{\mathbf{p}}, \Phi_0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \quad (4.7.39)$$

$$(\Psi_{\mathbf{p}}, \Phi_{\mathbf{x}}) = e^{-i\hat{\mathbf{P}}\mathbf{a}/\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \quad (4.7.40)$$

Miért jó ez a normálás?

$$\Psi_{\mathbf{p}}(x) = \frac{e^{+i\hat{\mathbf{P}}\mathbf{a}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \quad (4.7.41)$$

Ez egy síkhullám, mivel az impulzus a sajátértéke. Így:

$$(\Psi_{\mathbf{p}'}, \Psi_{\mathbf{p}}) = \int d^3x \frac{e^{-i(\hat{\mathbf{p}}-\hat{\mathbf{p}}')\mathbf{a}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} = \delta^{(3)}(\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}') \quad (4.7.42)$$

#### 4.7.4. Időbeli eltolás

Eddig nem volt szó az axiomatikus kvantummechanika tárgyalásában az időfejlődésről. Ha van egy  $\Psi \in \mathcal{H}$  állapotom, az függhet az időtől. Az időeltolás ennek a szimmetriája lesz!

Az előzőek alapján, ez azt jelenti, hogy létezik egy  $\hat{U}(\tau)$  transzformáció, ami azt tudja, hogy:

$$\hat{U}(\tau)\Psi(t) = \Psi(t + \tau) \quad (4.7.43)$$

Megint felhasználjuk azt a közelítést, hogy ha  $\tau$  kicsi, akkor:

$$\hat{U}(\tau) \approx \hat{I} - \frac{i}{\hbar}\hat{H} + \mathcal{O}(\tau^2) \quad (4.7.44)$$

Általánosságban pedig eltolás valamilyen  $\tau$ -ra:

$$\hat{U}(\tau) = e^{-\frac{i}{\hbar}\tau\hat{H}} \quad (4.7.45)$$

$\hat{H}$  az időeltolás generátora: ő a Hamilton-operátor.

Legyen kezdetben  $t = 0$ , ekkor  $\tau$  idő elteltével az állapot:

$$\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\tau\hat{H}}\Psi(0) = \hat{U}(t)\Psi(0) \quad (4.7.46)$$

$\hat{U}$  unitér, azaz skalárszorzat-tartó!

$$(\Psi(t), \Phi(t)) = (\Psi(0), \Phi(0)) \quad (4.7.47)$$

Ebből következik, hogy a normálás is megmarad, tehát a valószínűségi értelmezés értelmes.

Kicsit nézegetve az (4.7.46) egyenletet:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \quad (4.7.48)$$

Ez pedig nem más mint az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet általános alakja. Koordinátareprezentációban ez egy hullámfüggvényt fog adni.

Eddig feltételeztük, hogy csak az állapotoknak van időfejlődése, az operátoroknak nem. Ez volt a Schrödinger-kép.

Lehet ezt azonban másképpen is csinálni. Abból kiindulva, hogy maguk a hullámfüggvények nem mérhetőek, csak a mátrixelemek:

$$\left(\Psi, \hat{A}\Phi\right) \quad \Psi, \Phi \text{ időfejlődése "áttehető" } A\text{-ra} \quad (4.7.49)$$

$$\left(\Psi, \hat{A}\Phi\right)_t = \left(\Psi(t), \hat{A}\Phi(t)\right) = \left(\hat{U}\Psi, \hat{A}\hat{U}\Phi\right) = \quad (4.7.50)$$

$$= \left(\Psi(0), \hat{U}^+\hat{A}\hat{U}\Phi(0)\right) = \left(\Psi, \underbrace{\hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{U}}_{\hat{A}_H(t)}\Phi\right) = \left(\Psi, \hat{A}_H(t)\Phi\right) \quad (4.7.51)$$

Ez a Heisenberg-kép: az állapotok időfüggetlen, az operátorok változnak.

Ha  $\hat{A} = \hat{H} \rightarrow \hat{H}(t) = \hat{U}^{-1}\hat{U}\hat{H} = \hat{H}$ , mivel  $\hat{H}$  önmagával kommutál. Tehát a Hamilton operátor mind a két képben ugyanaz!

Mi történik, ha egy picit megváltoztatjuk az időt?

$$\hat{A}_H(t + \Delta t) = \hat{U}^{-1}(\Delta t)\hat{U}^{-1}(t)\hat{A}\hat{U}(t)\hat{U}(\Delta t) = \left(\hat{I} + \frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t\right)\hat{A}(t)\left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t\right) = \quad (4.7.52)$$

$$= \hat{A}_H(t) + \frac{i}{\hbar}\Delta t [\hat{H}, \hat{A}] + \mathcal{O}(\Delta t) \quad (4.7.53)$$

$$\frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] \quad (4.7.54)$$

Ez a Schrödinger-egyenlet Heisenberg-képben.

Ha  $\hat{A}$  kommutál a Hamilton-operátorral, akkor  $\hat{A}_H = 0$ , azaz  $\hat{A}_H$  megmaradó mennyiség.

Az ilyen megmaradó mennyiségek általában szimmetriákból származnak, valamilyen szimmetria generátorai. Ha  $\hat{U}$  egy szimmetria ábrázolása, akkor ha az időeltolással felcserélhető,  $\Psi$ -nek és  $\hat{U}\Psi$ -nek ugyanaz az időfejlődése.

$$\hat{U}\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\hat{U}\Psi(0) \quad (4.7.55)$$

Mivel ez igaz minden  $\Psi$ -re:

$$\hat{U}^{-1}e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}} = e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\hat{U} \quad (4.7.56)$$

$\hat{U}$  akármilyen szimmetria lehet, ha unitér és lineáris kommutál a Hamilton-operátorral. Olyan  $\hat{U}$ -t, amely anti-unitér módon ábrázolna egy szimmetriát nem fogunk találni, ugyanis:

$$\hat{U}^{-1}e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\hat{U} = \hat{I} + \frac{i}{\hbar}t\hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U} + \frac{1}{2!}\left(\frac{i}{\hbar}t\right)^2\hat{U}^{-1}\hat{H}^2\hat{U} + \dots \quad (4.7.57)$$

$$\hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U} = -\hat{H} \quad (4.7.58)$$

Ez azt jelentené, hogy minden  $E$  energiához tartozna egy  $-E$  energiájú állapot. Egyetlen kiút van, ha  $t$ -nek is megfordítjuk az előjelét.

Nem minden szimmetria ad megmaradó mennyiséget, csak amelyik a Hamilton-operátorral felcserél.

#### 4.7.5. Forgatási szimmetria, a Spin

Centrális potenciál esetén jól kijön az atomok spektruma, azonban a multiplicitás már nem, tipikusan kétszer annyi van, mint amit számolunk a Schrödinger-egyenletből. Nátrium esetén egy elektron csücsül a külső héjon. Őt jól lehet írni a maradék elektronok által "lefojtott" protonok centrális potenciáljában. Mivel az energia a mágneses kvantum-számtól nem függ,  $2l + 1$  kellene, hogy legyen a degeneráció mértéke. Spektroszkópiában általában minden energia helyett kettő volt, alig elkülönülve.

Pauliban merült fel először az a gondolat, hogy talán van még egy kvantumszám. Elsőként ezt úgy képzelték mint egyfajta belső impulzusmomentumot ( $S$ ).

Ha  $S$  tényleg impulzusmomentum, akkor az olyan, mint a pálya-impulzusmomentum, vagyis adott  $S$ -hez tartozik  $2s + 1$  degeneráció, azaz  $s = \frac{1}{2}$ , miközben  $L$  eddig csak egész lehetett.

Van más probléma is ezzel a forgó gömb képpel. Ugyanis a gömb felületi sebessége muszáj, hogy kisebb legyen a fénysebességnél, ebből azonban az következik, hogy  $r \geq 2 \cdot 10^{-11}$  cm lehet.

Másrészről viszont a kép jól magyarázta a felhasadást. Ezzel már a klasszikus mechanika nem tudott mit kezdeni. Ennek a vizsgálatához már hozzá kell nyúlni a forgatásszimmetriákhoz. Ezek olyan transzformációk, amelyek megtartják a skalárszorzatot és  $\hat{I}$ -vel folytonos kapcsolatban vannak.

$$x_i \rightarrow \sum_j R_{ij}x_j = x'_i \quad (4.7.59)$$

$$\mathbf{x}' \cdot \mathbf{y}' = \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} \rightarrow \sum_i \left( \sum_j R_{ij} x_j \sum_k R_{ik} y_k \right) = \sum_i x_i \cdot y_i \quad (4.7.60)$$

Azaz:

$$\sum_i R_{ij} R_{ik} = \delta_{jk} \rightarrow R^T R = I \quad (4.7.61)$$

Azaz  $R$  ortogonális. Vagyis:

$$\det^2(R^T R) = 1 \quad (4.7.62)$$

$$\det(R^T R) = \pm 1 \quad (4.7.63)$$

+1 az a választás, amelyben nincs tükrözés, így ez tud folytonosan átmenni 1-be. Mivel  $R$  szimmetria, így unitér módon kell, hogy ábrázolódjon.

$$\Psi \rightarrow \hat{U}(R)\Psi \quad (4.7.64)$$

Most  $R_1, R_2$  2 forgatás. A két forgatás egymásutánja:

$$(R_1 R_2)_{ij} = \sum_l R_{2il} R_{1lj} \rightarrow U(R_1 R_2) = U(R_1)U(R_2) \quad (4.7.65)$$

De most  $[U(R_1), U(R_2)] \neq 0$ .

$U(R_{ij})$  forgatásokat ábrázol, igazi forgatásként viselkedik. Fix mennyiségekre a következő képen kell hatnia: legyen a a vektorunk  $\hat{\mathbf{v}}$  (például  $\hat{\mathbf{x}}$  vagy  $\hat{\mathbf{p}}$ ):

$$\hat{U}^{-1}(R)\hat{\mathbf{v}}\hat{U}(R) = \sum_j R_{ij}\hat{v}_i \quad (4.7.66)$$

Mi lesz a generátor? Vizsgáljunk kis forgatást!

$$R_{ij} = \delta_{ij} + \omega_{ij} + \mathcal{O}(\omega^2) \quad (4.7.67)$$

Ne felejtsük (4.7.61) egyenlőséget:

$$(1 + \omega^T)(1 + \omega) + \mathcal{O}(\omega^2) \quad (4.7.68)$$

Azaz:

$$\omega^T = -\omega \quad (4.7.69)$$

$\omega$  antiszimmetrikus:

$$U(I + \omega) = 1 + \frac{i}{2\hbar} \sum_{ij} \omega_{ij} \hat{J}_{ij} + \mathcal{O}(\omega^2) \quad (4.7.70)$$

$\hat{J}_{ij}$  3 darab generátor. Írjuk vissza ezt a vektor transzformációba!

$$\left[ 1 - \frac{i}{2\hbar} \sum_{jk} \omega_{jk} \hat{J}_{jk} \right] \hat{v}_i \left[ 1 + \frac{i}{2\hbar} \sum_{jk} \omega_{jk} \hat{J}_{jk} \right] = \sum_j R_{ij} \hat{v}_j \quad (4.7.71)$$

$$\frac{i}{2\hbar} \sum_{jk} \omega_{jk} [\hat{v}_i, \hat{J}_{jk}] = \sum_j \omega_{ij} \hat{v}_j \quad (4.7.72)$$

$$\sum_{jk} \omega_{jk} \left\{ \frac{i}{2\hbar} [\hat{v}_i, \hat{J}_{jk}] - \delta_{jk} \hat{v}_j \right\} = 0 \quad (4.7.73)$$

Ez csak akkor lehet a zárójeles kifejezés antiszimmetrikus része nulla!

$$\frac{i}{2\hbar} [\hat{v}_i, \hat{J}_{jk}] = \frac{1}{2} (\delta_{ik} \hat{v}_j - \delta_{ij} \hat{v}_k) \quad (4.7.74)$$

Ennél a számolásnál semmi mást nem tételeztünk fel, mint hogy  $R$  forgatás.  $\hat{J}_{ij}$  transzformációs szabálya is megadható! Nézzük egy  $R'$  forgatást.

$$U(1 + \omega) \rightarrow U^{-1}(R')U(1 + \omega)U(R') = U(R'^{-1}(1 + \omega)R') = U(1 + R'^{-1}\omega R') \quad (4.7.75)$$

A két oldal:

$$\hat{I} + \frac{1}{2\hbar} \hat{U}^{-1}(R') \omega_{jk} \hat{J}_{jk} \hat{U}(R') = \hat{I} + \frac{1}{2\hbar} (R'^{-2} \omega R')_{jk} \hat{J}_{jk} = \hat{I} + \frac{1}{2\hbar} R'_{ij} R'_{lk} \omega_{il} \hat{J}_{jl} \quad (4.7.76)$$

$$\hat{U}^{-1}(R') \hat{J}_{jk} \hat{U}(R') = R'_{jl} R'_{km} \hat{J}_{lm} \quad (4.7.77)$$

$R'$  és  $\omega$  kicsi!

$$\frac{i}{\hbar} [J_{ij}, J_{kl}] = -\delta_{il} J_{jk} + \delta_{ik} J_{jl} + \delta_{ik} J_{il} - \delta_{jk} J_{ik} \quad (4.7.78)$$

Három dimenzióba bevezethetünk egy egyszerűbb jelölést, mivel  $\omega$ -nak és  $\hat{J}$ -nek három független komponense van:

$$\hat{J}_i = \sum_{jk} \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \hat{J}_{jk} \quad (4.7.79)$$

$$\omega_i = \frac{1}{2} \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} \omega_{jk} \quad (4.7.80)$$

Ezzel a jelöléssel:

$$\hat{U}(1 + \omega) = \hat{I} + \frac{i}{\hbar} \omega \hat{\mathbf{J}} + \mathcal{O}(\omega^2) \quad (4.7.81)$$

Kommutátorok  $\mathbf{v}$  vektorral:

$$[\hat{J}_i, \hat{v}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{v}_k \quad (4.7.82)$$

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k \quad (4.7.83)$$

$\hat{\mathbf{J}}$  a forgatások ábrázolásának generátora, a teljes impulzuszómomentum, de  $\hat{\mathbf{J}} \neq \hat{\mathbf{L}}$ . Viszont ugyanaz a kommutációs reláció érvényes mind a kettőre:

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k \quad (4.7.84)$$

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k \quad (4.7.85)$$



Mivel  $\hat{\mathbf{L}}$  vektor:

$$[\hat{J}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\hat{L}_k \quad (4.7.86)$$

A két impulzusmomentumnak nem feltétlenül kell megegyeznie, vezessük be a kettő különbségét:

$$\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{L}} \quad (4.7.87)$$

Ekkor (4.7.84)-(4.7.86) miatt:

$$[\hat{S}_i, \hat{L}_j] = 0 \quad (4.7.88)$$

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\hat{S}_k \quad (4.7.89)$$

Ez is valamiféle impulzusmomentumszerű mennyiség, de látszólag  $\hat{\mathbf{L}}$ -től független. Gondolhatunk erre úgy, mint egyfajta saját, belső impulzusmomentumra. Ez nevezzük spinnek.

A spin operátor nem az  $\hat{\mathbf{r}}$  és  $\hat{\mathbf{p}}$  vektorokból épül fel!

$$[\hat{S}_i, \hat{p}_j] = [\hat{S}_i, \hat{r}_j] = 0 \quad (4.7.90)$$

Ha több részecském van:

$$\hat{\mathbf{J}} = \sum_n \hat{\mathbf{L}}_n + \sum_n \hat{\mathbf{S}}_n \quad (4.7.91)$$

#### 4.7.6. $\hat{J}^2$ és $\hat{J}_3$ spektruma

Vizsgáljuk meg  $\hat{J}^2$  és  $\hat{J}_3$  sajátértékeit!

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_3] = 0 \quad (4.7.92)$$

Legyen  $\hat{J}^\pm = \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2$ . Ekkor:

$$[\hat{J}_3, \hat{J}^\pm] = [\hat{J}_3, i\hat{J}_1 \pm \hat{J}_2] = [\hat{J}_3, \hat{J}_1] \pm i[\hat{J}_3, \hat{J}_2] = \quad (4.7.93)$$

$$= i\hbar(\hat{J}_2 \mp i\hat{J}_1) = \hbar(i\hat{J}_2 \pm \hat{J}_1) = \pm\hbar(\hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2) = \pm\hbar\hat{J}^\pm \quad (4.7.94)$$

$\hat{J}^\pm$  léptető operátorok. Legyen  $|lm\rangle$  a  $\hat{J}_3$  és  $\hat{J}^2$  közös függvényrendszere. Ekkor:

$$\hat{J}_3\hat{J}^+|jm\rangle = \left(\hat{J}^+\hat{J}_3 + [\hat{J}_3, \hat{J}^+]\right)|jm\rangle = \left(\hat{J}^+\hat{J}_3 + \hbar\hat{J}^+\right)|jm\rangle = \hat{J}^+(\hbar(m+1))|jm\rangle = \hbar(m+1)\hat{J}^+|jm\rangle \quad (4.7.95)$$

Vagyis  $\hat{J}^+|jm\rangle$  is sajátvektor  $\alpha^+\hbar(m+1)$  sajátértékkal és hasonlóan  $\hat{J}^-|jm\rangle$  is sajátvektor  $\alpha^-\hbar(m-1)$  sajátértékkal, ahol  $\alpha^\pm$  valamilyen konstans.

Legyen  $j$  fix. A hármas komponenszt növelgethetjük  $\hat{J}_3$ -ral, ez nem nőhet akármekkora, különben egy bizonyos idő után a vektor harmadik komponense nagyobb lenne, mint az egész vektor. Pontosabban tetszőleges  $|jm\rangle$ -re:

$$\hbar^2j(j+1) - \hbar^2m^2 \langle jm|\hat{J}^2 - \hat{J}_3^2|jm\rangle = \langle jm|\hat{J}_1^2 + \hat{J}_3^2|jm\rangle \geq 0 \quad (4.7.96)$$

Azaz:

$$j(j+1) \geq m^2 \quad (4.7.97)$$

Tehát van egy  $m_{max}$  és egy  $m_{min}$ . Ezekre:

$$\hat{J}^+ |jm_{max}\rangle = 0 \quad \text{illetve} \quad \hat{J}^- |jm_{min}\rangle = 0 \quad (4.7.98)$$

$$\hat{J}^- \hat{J}^+ = (\hat{J}_1 + i\hat{J}_2) (\hat{J}_1 - i\hat{J}_2) = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + i [\hat{J}_1, \hat{J}_2] = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 - \hbar \hat{J}_3 = \hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 - \hbar \hat{J}_3 \quad (4.7.99)$$

Hasonlóan:

$$\hat{J}^+ \hat{J}^- = \hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 + \hbar \hat{J}_3 \quad (4.7.100)$$

(4.7.98) miatt:

$$\hat{J}^- \hat{J}^+ |jm_{max}\rangle = (\hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 - \hbar \hat{J}_3) |jm_{max}\rangle = \quad (4.7.101)$$

$$= \hbar^2(j(j+1) - m_{max}^2 - m_{max}) |jm_{max}\rangle = j(j+1) - m_{max}(m_{max}+1) = 0 \quad (4.7.102)$$

Ez csak akkor lehet, ha

$$m_{max} = \begin{cases} j \\ -(j+1) \end{cases}$$

Hasonlóan:

$$\hat{J}^+ \hat{J}^- |jm_{min}\rangle = 0 \quad (4.7.103)$$

$$j(j+1) - m_{min}(m_{min}-1) = 0 \quad (4.7.104)$$

$$m_{min} = \begin{cases} -j \\ (j+1) \end{cases}$$

Látszólag ez négy megoldás, de mivel a minimum az a kisebb, mint a maximum, így:

$$m_{min} = -j \quad (4.7.105)$$

$$m_{max} = j \quad (4.7.106)$$

Ezen kívül láttuk, hogy  $\hat{J}^\pm$  egészszel léptet, így  $m_{max} - m_{min} = 2j = n$  egész esetén  $j = \frac{n}{2}$ . Ugyanaz, mint korábban  $\hat{\mathbf{L}}$  esetén, csak most félegész is lehet!

Normálás:

$$\langle jm | j'm' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (4.7.107)$$

$$\hat{J}^+ |jm\rangle = \alpha^+ |jm+1\rangle \quad (4.7.108)$$

$$\hat{J}^- |jm\rangle = \alpha^- |jm-1\rangle \quad (4.7.109)$$

Mik lesznek ezek a konstansok? Észre kell venni, hogy  $\hat{J}^\pm$  egymás andjungáltjai:

$$\left| \hat{J}^+ |jm\rangle \right|^2 = (\hat{J}^+ \Psi_{jm}, \hat{J}^+ \Psi_{jm}) = \langle \Psi_{jm} | \hat{J}^+ \hat{J}^- | \Psi_{jm} \rangle = \quad (4.7.110)$$

$$= \langle jm | \hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 - \hbar \hat{J}_3 | jm \rangle = \hbar^2 (j(j+1) - m(m+1)) \langle jm | jm \rangle \quad (4.7.111)$$

$$\rightarrow \alpha^+ = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \cdot \underbrace{\text{fázis}}_1 \quad (4.7.112)$$

$$\rightarrow \alpha^- = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \quad (4.7.113)$$

Összefoglalva tehát:

$$\hat{J}^\pm = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |jm \pm 1\rangle \quad (4.7.114)$$

Mivel  $[\hat{J}^2, \hat{J}_i] = 0$ , így  $[\hat{J}^2, \hat{U}(R)] = 0$ . Azaz a  $\hat{J}^2$  sajátállapotok egymás között transzformálódnak. A teljes Hilbert-tér szétesik ortogonális alterekre, melyeken más a  $\hat{J}^2$  sajátértéke, ezek között  $U$ -k nem visznek át.

Az ilyen ábrázolások reducibilisek. Irreducibilis lenne akkor, ha minden  $U$  block-diagonális lenne.

#### 4.7.7. Véges dimenziós irreducibilis ábrázolások

Legyen a Hilbert-tér véges dimenziós és  $j$  fix. Például csak a spin tulajdonságai érdekelnek. Ilyenkor  $m$ -nek  $2j+1$  értéke lehet. Mivel  $\langle jm | jm \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}$ , így tulajdonképpen van  $2j+1$  db független bázisvektorom. Ha  $\mathcal{H}$  éppen  $2j+1$  dimenziós, máris van egy bázisom, amin megkonstruálhatom.

Vegyünk tehát egy  $2j+1$  dimenziós Hilbert teret és adjuk meg  $\hat{J}_1, \hat{J}_2, \hat{J}_3$ -at.

- $j = 0 \quad d = 1$

$$\hat{U}(R) = \hat{I} \text{ triviális ábrázolás, } \hat{J}_i = 0$$

- $j = \frac{1}{2} \quad d = 2$ . Válasszunk olyan bázist, melyen  $\hat{J}_3$  diagonális!

$$\hat{J}_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.7.115)$$

$$|jm\rangle = \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.7.116)$$

$$|jm\rangle = \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.7.117)$$

Ahhoz, hogy megkapjuk  $\hat{J}_2$ -t vizsgáljuk meg, hogyan hat  $\hat{J}^\pm$ .

$$\hat{J}^+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hat{J}^+ \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \quad (4.7.118)$$

Ez nulla, mert fölfelé már nem tud léptetni!

$$\hat{J}^+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hat{J}^+ \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.7.119)$$

$$\hat{J}^+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{hasonlóan} \quad \hat{J}^- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.7.120)$$

$$\hat{J}_1 = \frac{1}{2} (\hat{J}^+ + \hat{J}^-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.7.121)$$

$$\hat{J}_2 = \frac{1}{2} (\hat{J}^+ - \hat{J}^-) = \frac{\hbar}{2i} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.7.122)$$

Ezek éppen a Pauli-mátrixok. Ez a spinor ábrázolás, egy feles spinű részecskét ír le.

- $j = 1 \quad d = 3$  Megint válasszunk olyan bázist, ahol  $\hat{J}_3$  diagonális

$$\hat{J}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad |11\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.7.123)$$

$$\hat{J}^+ |11\rangle = 0 \quad \hat{J}^+ |10\rangle = \sqrt{2}\hbar |11\rangle \quad \hat{J}^+ |1-1\rangle = \sqrt{2}\hbar |10\rangle \rightarrow \hat{J}^+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.7.124)$$

Hasonlóan:

$$\hat{J}^- = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.7.125)$$

Ebből:

$$\hat{J}_1 = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{J}_2 = \frac{\hbar i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.7.126)$$

Mivel  $[\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{S}}] = [\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{S}}] = 0$ , így  $\hat{\mathbf{S}}$  sajátállapotait az impulzus és a koordináta nem rontja el, és fordítva,  $\mathcal{H}$  szétesik  $2j + 1$  darab altérre.

$$|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi_\alpha\rangle = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \vdots \\ \Psi_{2j} \end{pmatrix} \quad (4.7.127)$$

Az impulzus és a koordináta komponensenként hatnak. Ilyenkor a spin operátora egy véges dimenziós egységmátrix. Mondjuk ha  $s = \frac{1}{2}$  (elektron), akkor

$$\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2} \sigma \mathbf{I} \quad (4.7.128)$$

Hogyan módosítja ez a Hamilton-operátort? Ha nincs semmi, ami kölcsönhatna a spinnel:

$$\hat{H} = \hat{I} \times \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}) \right) \quad (4.7.129)$$

Ha van valami, ami kölcsönhat vele, például mágneses tér, akkor egyrészt megváltozik a Hamilton:

$$\delta\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{B}}e}{2m} \quad (4.7.130)$$

De kölcsönhat a spinnel is!

$$\delta\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{B}}e}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{B}}e}{2m}g \quad (4.7.131)$$

Ahol  $g$  valamilyen együttható. Ilyen alakot várunk. Perturbációs számítással lehet meghatározni, hogyan változik emiatt a hidrogén atom spektruma.

#### 4.7.8. Impulzuszmomentumok összeadása

Láttuk, hogy  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ . A kérdés az, ha ismerjük  $\hat{\mathbf{L}}$  és  $\hat{\mathbf{S}}$  sajátállapotait, mik lesznek  $\hat{\mathbf{J}}$  sajátállapotai? Vagy általánosabban megfogalmazva: adjuk össze  $\hat{\mathbf{J}}'$  és  $\hat{\mathbf{J}}''$  impulzuszmomentumokat úgy, hogy:

$$[\hat{\mathbf{J}}', \hat{\mathbf{J}}''] = 0 \quad (4.7.132)$$

Azaz egy nagy közös vektorrendszert lehet választani. Illetve mindenki, mindenkivel kommutál:

$$[\hat{J}''^2, \hat{J}''_3] = 0 = [\hat{J}'^2, \hat{J}'_3] = 0 \quad (4.7.133)$$

Léteznek  $|j'm'\rangle |j''m''\rangle$  közös vektorrendszerek. Ha  $j'$  és  $j''$  fix, akkor  $m'$   $2j' + 1$ -ig,  $m''$   $2j'' + 1$ -ig mehet.

$$\hat{J}'^2 |j'm'\rangle |j''m''\rangle = \hbar^2 j'(j' + 1) |j'm'\rangle |j''m''\rangle \quad (4.7.134)$$

$$\hat{J}''^2 |j'm'\rangle |j''m''\rangle = \hbar^2 j''(j'' + 1) |j'm'\rangle |j''m''\rangle \quad (4.7.135)$$

$$\hat{J}'_3 |j'm'\rangle |j''m''\rangle = \hbar m' |j'm'\rangle |j''m''\rangle \quad (4.7.136)$$

$$\hat{J}''_3 |j'm'\rangle |j''m''\rangle = \hbar m'' |j'm'\rangle |j''m''\rangle \quad (4.7.137)$$

A teljes impulzuszmomentum:

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}' + \hat{\mathbf{J}}'' \quad (4.7.138)$$

Mik lesznek  $\hat{\mathbf{J}}^2$  és  $\hat{J}_3$  sajátállapotai? (4.7.132) miatt:

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = (\hat{\mathbf{J}}' + \hat{\mathbf{J}}'')^2 = \hat{\mathbf{J}}'^2 + \hat{\mathbf{J}}''^2 + 2\hat{\mathbf{J}}'\hat{\mathbf{J}}'' \quad (4.7.139)$$

$$[\hat{J}^2, \hat{J}'^2] = [\hat{J}'^2, \hat{J}'] + [\hat{J}', \hat{J}''^2] + 2[\hat{J}'\hat{J}'', \hat{J}'^2] = 0 \quad (4.7.140)$$

$$[\hat{J}^2, \hat{J}''^2] = 0 \quad (4.7.141)$$

De sajnos:

$$[\hat{J}^2, \hat{J}'_3] = [\hat{J}'^2, \hat{J}'_3] + [\hat{J}''^2, \hat{J}'_3] + 2[\hat{J}'\hat{J}'', \hat{J}'_3] \neq 0 \quad (4.7.142)$$

Tehát nem lehet mindenki sajátállapota  $|jm\rangle$ -en, választani kell egy halmazt. Legyen ez olyan, hogy  $\hat{J}^2, \hat{J}'^2, \hat{J}''^2, \hat{J}_3$ -nek közös sajátállapotai.

Állítás:

$$|jm\rangle = \sum_{m'm''} C_{j'j''} (jmjm'm'') |j'm'\rangle |j''m''\rangle \quad (4.7.143)$$

ahol  $C_{j'j''}$  az úgynevezett Clebsch-Gordon együtthatók. Ezek akkor nem nullák, ha

- $|j' - j''| \leq j \leq j' + j''$
- $m = m' + m''$

A második onnan látszik, hogy  $\hat{J}_3$ -nak sajátvektorai  $|j'm'\rangle |j''m''\rangle$ .

$$\text{Egyrészt: } (\hat{J}'_3 + \hat{J}''_3) |j'm'\rangle |j''m''\rangle = \hbar(m' + m'') |j'm'\rangle |j''m''\rangle.$$

$$\text{Másképp: } \hat{J}_3 |jm\rangle = \hbar m |jm\rangle.$$

Az elsőhöz látni kell az együtthatókat.

$|jm\rangle$   $\hat{J}^2$  sajátvektora, írjuk fel  $\hat{J}^2$ -et:

$$\hat{J}^2 = \hat{J}'^2 + \hat{J}''^2 + 2\hat{J}'\hat{J}'' = \hat{J}'^2 + \hat{J}''^2 + 2\hat{J}'_3\hat{J}''_3 + 2(\hat{J}'_1\hat{J}''_1 + \hat{J}'_2\hat{J}''_2) \quad (4.7.144)$$

$$\hat{J}_1 = \frac{i}{2} (\hat{J}_+ + \hat{J}_-) \quad (4.7.145)$$

$$\hat{J}_2 = \frac{i}{2} (\hat{J}_- - \hat{J}_+) \quad (4.7.146)$$

Ezt behelyettesítjük. Amire szükségünk lesz:

$$\hat{J}'_1\hat{J}''_1 + \hat{J}'_2\hat{J}''_2 = \frac{1}{4} (\hat{J}'_+ + \hat{J}'_-) (\hat{J}''_+ + \hat{J}''_-) - \frac{1}{4} (\hat{J}'_+ - \hat{J}'_-) (\hat{J}''_- - \hat{J}''_+) \quad (4.7.147)$$

$$= \frac{1}{2} (\hat{J}'_- \hat{J}''_+ + \hat{J}'_+ \hat{J}''_-) \quad (4.7.148)$$

Tehát:

$$\hat{J}^2 = \hat{J}'^2 + \hat{J}''^2 + 2\hat{J}'_3\hat{J}''_3 + \hat{J}'_- \hat{J}''_+ + \hat{J}'_+ \hat{J}''_- \quad (4.7.149)$$

Azt tudjuk, hogy  $\hat{J}^2$  hogyan hat  $|jm\rangle$ -re, fel kell írni az erre vonatkozó egyenleteket és megoldani. De van más megoldási lehetőség is! Emlékeztető:  $m = m' + m''$ . Mivel  $|m'| \leq j'$  és  $|m''| \leq j''$ , így  $|m| = |m' + m''| \leq |m'| + |m''| \leq j' + j''$ . Ha  $j = m_{\max}$ , akkor:

$$j \leq j' + j'' \quad (4.7.150)$$

A teljes impulzusmomentum nem lehet kisebb, mint a 2 összege. A kifejezésben lehet egyenlőség is:  $m' = j'$ ,  $m'' = j''$  és  $m = j$ . Ekkor:

$$|jm = j\rangle = |j'm' = j'\rangle |j''m'' = j''\rangle \quad (4.7.151)$$

Ha erre a kifejezésre haddatjuk  $\hat{J}^2$ -et, az tényleg sajátállapot lesz:

$$\hat{J}^2 |j'j'\rangle |j''j''\rangle = \hbar^2 [j'(j'+1) + j''(j''+1) + 2j'j'' + 0 + 0] |j'j'\rangle |j''j''\rangle = \quad (4.7.152)$$

$$\hbar^2 j(j+1) |j'j'\rangle |j''j''\rangle \quad (4.7.153)$$

Vagyis:

$$C_{j'j''} (j = j' + j'', m = j' + j'', m'm'') = \delta_{m'j'} \delta_{m''j''} \quad (4.7.154)$$

Ugyanehhez a  $j$ -hez megkapjuk a kisebb  $m$ -eket, ha erre hattatjuk a teljes  $\hat{J}_-$ -t ( $\hat{J}'_- + \hat{J}''_-$ ).

$$|jj\rangle \rightarrow \hat{J}_- |jj\rangle = \alpha_-(j, j) |jj-1\rangle \quad (4.7.155)$$

$$\hat{J}_- \hat{J}_- |jj\rangle = \alpha_-(j, j-1)\alpha_-(j, j) |jj-2\rangle \quad (4.7.156)$$

$$\vdots \quad (4.7.157)$$

$$\hat{J}_- |jj\rangle = \alpha_-(j, j) |jj-1\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - j(j-1)} |jj-1\rangle = \hbar\sqrt{2j} |jj-1\rangle \quad (4.7.158)$$

$$\hbar\sqrt{2j} |jj-1\rangle = (\hat{J}'_- + \hat{J}''_-) |j'j'\rangle |j''j''\rangle \quad (4.7.159)$$

$$\hbar\sqrt{2j} |jj-1\rangle = \hbar \left( \sqrt{2j'} |j'j'-1\rangle |j''j''\rangle + \sqrt{2j''} |j'j'\rangle |j''j''-1\rangle \right) \quad (4.7.160)$$

$\hat{J}'_-$  alkalmazva:

$$\sqrt{2j'}\sqrt{j(j+1) - (j-1)(j-2)} |jj-2\rangle = C_1 |j'j'-2\rangle |j''j''\rangle + C_2 |j'j'-1\rangle |j''j''-1\rangle + C_3 |j'j'\rangle |j''j''-2\rangle \quad (4.7.161)$$

3 tag van, ha  $j'' \geq 2$  és  $j' \geq 2$ .

$n-1$  lépés után  $n$  darab tag lesz. Legyen  $j' \leq j''$ . A maximális  $j$ -hez legyárthatom az együtthatókat:

$m$	tagok száma
$j' + j''$	1
$j' + j'' - 1$	2
$j'' - j'$	$2j' + 1$
$j'' - j' - 1$	$2j' + 1$
$\vdots$	$\vdots$
$j' - j''$	$2j' + 1$
$j' - j'' - 1$	$2j'$
$-j' - j'' + 1$	2
$-j' - j''$	1

Példa: Adjunk össze két feles spinű részecskét. Vagyis  $j' = j'' = \frac{1}{2}$ .

$j = 0, 1$  Jelölés  $j'j''$ -re:  $|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle = |\uparrow\rangle$ ;  $|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle = |\downarrow\rangle$ . Mivel  $(2j' + 1)(2j'' + 1) = 4$ , így 4 állapot van:

$$|\uparrow\rangle |\uparrow\rangle \quad |\uparrow\rangle |\downarrow\rangle \quad |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle \quad |\downarrow\rangle |\downarrow\rangle \quad (4.7.162)$$

Kiindulunk a maximálisból:  $|jj\rangle = |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle = |\uparrow\rangle |\uparrow\rangle$

Erre hattatjuk a  $\hat{J}_-$ -t kétféleképpen:

$$\hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |11\rangle = \sqrt{2}\hbar |10\rangle \quad (4.7.163)$$

$$\sqrt{2} |10\rangle = (\hat{J}'_- + \hat{J}''_-) \left| \frac{1}{2}\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}\frac{1}{2} \right\rangle = \quad (4.7.164)$$

$$= \sqrt{\frac{13}{22} - \frac{1}{2} \left( -\frac{1}{2} \right)} \left[ \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}\frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}\frac{1}{2} \right\rangle \right] = (|\uparrow\rangle |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle) \quad (4.7.165)$$

Tehát:

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (4.7.166)$$

Ha erre hattatjuk a teljes  $\hat{J}^2$ -t vagy  $\hat{J}_3$ -at, akkor valóban  $|10\rangle$  kapunk. Hattassuk megint a  $\hat{J}_-$ -t!

$$\hbar\sqrt{2}|1-1\rangle = \hbar\frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\downarrow\rangle + |\uparrow\uparrow\rangle) \quad (4.7.167)$$

Kaptunk 3 darab állapotot  $j = 1$  esetén.  $m = 0$ -ban 2 darab független vektor van. Ezeknek egyik lineárkombinációját már megkaptuk. Az volt az állítás, hogy létezik erre merőleges lineáris kombináció. Az lesz a  $|00\rangle$  állapot.

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (4.7.168)$$

Összefoglalva a következő állapotokat kaptuk:

$$\begin{aligned} |11\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle |\uparrow\uparrow\rangle \\ |10\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \quad j = 1 \text{ triplet} \\ |1-1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\downarrow\rangle + |\uparrow\uparrow\rangle) \end{aligned} \quad (4.7.169)$$

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad \text{szinglet}$$

Egy másik példa: legyen  $\hat{\mathbf{J}}' = \hat{\mathbf{L}}$  és  $\hat{\mathbf{J}}'' = \hat{\mathbf{S}}$ , úgy, hogy  $\hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}$ . Ez egy elektron hidrogén atomban. Tetszőleges egész és félegész impulzuszómomentumot adunk össze. A teljes  $j$ -re:

$$\hat{\mathbf{L}} \rightarrow l, m_l \quad \hat{\mathbf{J}} \rightarrow j, m \quad (4.7.170)$$

$$\left| l - \frac{1}{2} \right| \leq j \leq l + \frac{1}{2} \quad (4.7.171)$$

2 különböző eset:

- $l = 0$  azaz nincs pálya-impulzuszómomentum. Ilyenkor a  $j$  csak  $\frac{1}{2}$ .
- $l > 0$  ilyenkor  $j = l \pm \frac{1}{2}$ . Ilyenkor két lehetőség van. Ha van a Hamiltonban  $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$  akkor lesz felhasadás.

Ezek alapján újra lehet gondolni a hidrogénatom spektrumát. Az állapotok  $n, l, j$ -vel indexeljük ( $s$  ugye mindig  $\frac{1}{2}$ ).

$$\begin{array}{cccc} 1s_{\frac{1}{2}} & 2s_{\frac{1}{2}} & 3s_{\frac{1}{2}} & \cdots \\ & 2p_{\frac{1}{2}} & 3p_{\frac{1}{2}} & \\ & 2p_{\frac{3}{2}} & 3p_{\frac{3}{2}} & \\ & & 3d_{\frac{5}{2}} & \\ & & 3d_{\frac{3}{2}} & \end{array} \quad (4.7.172)$$



Érdekeség:  $\frac{1}{2}$  spin esetén  $\hat{J}_i = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_i$ -k voltak a generátorok. Általános transzformáció:

$$U(\omega) = \mathbf{I} + \frac{i}{2}\sigma_j\omega_j \quad (4.7.173)$$

Ez kiírva:

$$\sigma_j\omega_j = \begin{pmatrix} \omega_3 & \omega_1 - i\omega_2 \\ \omega_1 + i\omega_2 & -\omega_3 \end{pmatrix} \quad (4.7.174)$$

Ez a legáltalánosabb  $2 \times 2$ -es spúrtalan hermitikus mátrix  $\rightarrow U$  a legáltalánosabb  $2 \times 2$ -es unitér mátrix. Azaz az  $\frac{1}{2}$ -es spinű részecskékre az  $U$ -k  $SU(2)$  csoportot alkotnak.  $SO(3)$ ból indultunk, akkor ez most hogy lehetséges?

$SU(2)$  és  $SO(3)$  kis transzformációkra Lie-algebra  $U$ -kra, de nagy transzformációkra már nem reprezentál igazi forgatást. Ezt már korábban láttuk.

### Wigner-Eckart tétel:

Elsőként definiálni kell, hogy mit értünk adott spinű operátoron.  $2j + 1$  darab  $O_j^m$  operátort  $j$  spinűnek mondunk, hogy ha úgy viselkedik, mint maga a spin sajátállapot. Mivel  $O$  operátor, így nem tudjuk rá hattatni az impulzusmomentum operátort, ezt a kommutátorral fejezzük ki:

$$[\hat{J}_3, \hat{O}_j^m] = \hbar m \hat{O}_j^m \quad (4.7.175)$$

$$[\hat{J}_\pm, \hat{O}_j^m] = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \hat{O}_j^{m \pm 1} \quad (4.7.176)$$

Nézzünk is rögtön két példát!

$O_0^0$ , ez skalár, azaz minden impulzusmomentum-operátor komponens kommutál vele.

A másik egyszerű példa az a vektoroperátor, mint a koordináta, impulzus stb. Jelöljük  $\hat{V}_i$ -vel. Már láttuk korábban, hogy

$$[\hat{J}_i, \hat{V}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{V}_k \quad (4.7.177)$$

Ez persze nem olyan, mint ami (4.7.175)-ban van, de lehet definiálni 3 komponenst:

$$\hat{V}_1^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{V}_1 + i\hat{V}_2) \quad (4.7.178)$$

$$\hat{V}_1^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{V}_1 - i\hat{V}_2) \quad (4.7.179)$$

$$\hat{V}_1^0 = \hat{V}_3 \quad (4.7.180)$$

Ezek már tudják:

$$[\hat{J}_3, \hat{V}_1^m] = \hbar m \hat{V}_1^m \quad (4.7.181)$$

Általános operátorra is tudunk példát mondani, meg lehet mutatni, hogy ha a koordináta operátort tesszük a gömbfüggvények hasába, akkor az is egy ilyen típusú operátor lesz.

$$\hat{r}^l Y_l^m(\hat{r}) = \hat{O}_l^m \quad (4.7.182)$$

A következők mondja a tétel: Ha veszem egy mátrixelemét egy ilyen operátornak, akkor az pontosan úgy viselkedik, mint az impulzusmomentum összeadás.

$$\langle jm | \hat{O}_{j''}^{m''} | j' m' \rangle = C_{j'j''}(jm, m' m'') \langle j || \hat{O} || j \rangle \quad (4.7.183)$$

Pont a Clebsch-Gordon együtthatók jelennek meg és  $\langle j || \hat{O} || j \rangle$ -t nevezzük redukált mátrixelemnek.

Nézzünk erre is példát: a legtriviálisabb példa a skalároperátor  $\hat{O}_0^0 = \hat{S}$ . Most nem változik meg, így ugyanannak kell lennie mind a két oldalon:

$$\langle jm | \hat{S} | j' m' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \langle j || \hat{S} || j \rangle \quad (4.7.184)$$

A másik példa: vegyünk két vektoroperátort, legyenek  $\hat{V}_i$  és  $\hat{W}_i$ . Az az állítás, hogy ezeknek a mátrixelemei impulzusmomentum sajátállapotok között párhuzamosak, ez a tétel következménye.

$$\langle jm | \hat{V}_1^{m''} | j' m' \rangle = C_{j'1}(jm, m' m'') \langle j || V || j' \rangle \quad (4.7.185)$$

$$\langle jm | \hat{W}_1^{m''} | j' m' \rangle = C_{j'1}(jm, m' m'') \langle j || W || j' \rangle \quad (4.7.186)$$

Ez a két mátrixelem már skalár. Ha elosztjuk egymással a két egyenletet, akkor:

$$\langle jm | \hat{V}_1^{m''} | j' m' \rangle = \frac{\langle j || V || j' \rangle}{\langle j || W || j' \rangle} \langle jm | \hat{W}_1^{m''} | j' m' \rangle \quad (4.7.187)$$

Ezek a  $\hat{V}^{\pm 1,0}$  csak lineáris kombinációi az eredeti komponenseknek, tehát ha ez igaz  $m'' = 1, -1, 0$ -ra, akkor a lineáris kombinációkra is igaz. Ebből az is következik, hogy a hányados az konstans, tehát a két vektor párhuzamos, mert komponenseik között csak egy konstans szorzó van.

## 4.8. Azonos részecskék

Ez megint egy olyan tulajdonsága a kvantummechanikának, amelyet a klasszikus képpel nehéz elképzelni, de ez a tapasztalat, el kell fogadni. Az az állítás, hogy minden elektron azonos, egyforma. Ez azt jelenti, hogy csak a helyük, impulzusuk illetve a spin komponenseik különböztetik meg őket egymástól. Semmilyen más olyan tulajdonságuk nincs, amivel meg lehetne őket különböztetni, hiszen ha tudnánk ilyen "címkéket" rájuk ragasztani, az egy extra tulajdonságuk lenne és azt mérni is tudnánk. De ilyet nem mérünk.

Ebből az következik, hogy egy olyan rendszerben, amelyben két elektron van az nem érzékeny arra, hogy ha két elektront felcserélem egymással. Ez persze nem csak az elektrorra van így, ha minden részecskére, sőt még az összetett részecskékre is, ha minden belső tulajdonságaikat ismerjük.

Kicsit precízebben megfogalmazva, ha veszünk egy több részecske rendszert, akkor az állapotot az egyes részecskék helye, impulzusa és spinje jellemzi.

$$\Psi_{\mathbf{x}_1 m_1, \mathbf{x}_2 m_2, \dots} \quad (4.8.1)$$

Az, hogy megkülönböztethetetlenek, az látszik abban is, hogy az indexek sorrendje nem hordoz semmiféle fizikai információt.

Gondoljunk először csak két részecskére:

$$\Psi_{\mathbf{x}_1 m_1, \mathbf{x}_2 m_2} = \Psi_{\mathbf{x}_2 m_2, \mathbf{x}_1 m_1} \quad (4.8.2)$$

A kettő ugyanaz a fizikai állapot kell, hogy legyen. Ez persze nem jelenti azt, hogy ugyanaz a két vektor a Hilbert térben, maximum egy konstans szorzóban térhetnek el egymástól.

$$\Psi_{\mathbf{x}_1 m_1, \mathbf{x}_2 m_2} = \alpha \Psi_{\mathbf{x}_2 m_2, \mathbf{x}_1 m_1} = \alpha^2 \Psi_{\mathbf{x}_1 m_1, \mathbf{x}_2 m_2} \quad (4.8.3)$$

$\alpha$  nem függhet, csak a részecske típusától.

$$\alpha^2 = 1 \quad (4.8.4)$$

Némi algebrával  $\alpha$  értéke csak két komplex szám lehet:  $+1$  vagy  $-1$ . Ettől függően különböztetünk meg kétféle részecskét.

- $+1$  típusú részecske a bozon
- $-1$  típusú részecske a fermion

Fermion az valami fura dolog, ez az ami klasszikusan nehezen elképzelhető, ha felcserélek két részecskét, akkor a hullámfüggvény muszáj, hogy előjelet váltson.

Speciális relativitáselméletből kihozható az úgynevezett spinstatisztika-tétel, ami azt mondja, hogy ez a tulajdonság szoros kapcsolatban áll a spinnel.

A feles spinű részecskék mindig fermionok, az egész spinű részecskék pedig mindig bozonok.

Összetett részecskék esetén a cserénél minden tagot meg kell cserélni, a végeredmény a fermionok paritásától fog függni: a páratlan sok fermion feles, a páros pedig egész, azaz bozon lesz az összetett részecske. Így például a proton és a neutron fermion, míg a mezonok bozonok.

#### 4.8.1. Kicserélődési kölcsönhatás

Vizsgáljuk az azonos részecskéket a hullámfüggvények nyelvén!

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \alpha \Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) \quad (4.8.5)$$

Fermionokra az a  $\alpha$  értéke  $-1$ , azaz bármely változó cseréjére teljesen antiszimmetrikus. Bozonokra éppen fordítva.

Példa okáért legyen két darab részecske, melyek nem hatnak egymással kölcsön és vizsgálódjunk 1 dimenzióban. Egymástól függetlenül ugyanazt a potenciált érzik.

Legyen az egyik  $\Psi_A(x)$  sajátállapotban, a másik pedig  $\Psi_B(x)$  sajátállapotban. Ezek persze ortogonálisak egymásra.

Mennyi a távolság várható értéke abban az esetben, ha a részecskék megkülönböztethetők (klasszikus kép) és ha bozon, vagy fermion?

- megkülönböztethető részecskék:

$$\Psi(x_1x_2) = \Psi_A(x)\Psi_B(x) \quad (4.8.6)$$

- fermionok vagy bozonok: szimmetriákat figyelembe kell venni:

$$\Psi(x_1x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_A(x_1)\Psi_B(x_2) \pm \Psi_B(x_2)\Psi_A(x_1)] \quad (4.8.7)$$

Amit ki akarunk számolni, az a várható érték:

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x_1^2 \rangle + \langle x_2^2 \rangle - 2 \langle x_1x_2 \rangle \quad (4.8.8)$$

- megkülönböztethető eset:

$$\langle x_1^2 \rangle = \int dx_1 dx_2 x_1^2 |\Psi(x_1x_2)|^2 = \int dx_1 x_1^2 |\Psi_A(x_1)|^2 \underbrace{\int dx_2 |\Psi_B(x_2)|^2}_{1, \text{ mivel normált}} \quad (4.8.9)$$

$$\langle x_1^2 \rangle = \langle x^2 \rangle_A \quad (4.8.10)$$

Hasonlóan:

$$\langle x_2^2 \rangle = \langle x^2 \rangle_B \quad (4.8.11)$$

$$\langle x_1x_2 \rangle = \int dx_1 \int dx_2 x_1x_2 |\Psi_A(x_1)|^2 |\Psi_B(x_2)|^2 = \int dx_2 x_2 |\Psi_B(x_2)|^2 \int dx_1 x_1 |\Psi_A(x_1)|^2 \quad (4.8.12)$$

$$\langle x_1x_2 \rangle = \langle x_1 \rangle_A + \langle x_2 \rangle_B \quad (4.8.13)$$

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle_A + \langle x^2 \rangle_B - 2 \langle x_1 \rangle_A \cdot \langle x_2 \rangle_B = (\langle x^2 \rangle_A + \langle x^2 \rangle_B)^2 \quad (4.8.14)$$

- bozon, vagy fermion esetére:

$$\langle x_1^2 \rangle = \int dx_1 dx_2 x_1^2 |\Psi(x_1x_2)|^2 = \quad (4.8.15)$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ \int dx_1 dx_2 [x_1^2 (\Psi_A^*(x_1)\Psi_B^*(x_2) \pm \Psi_B^*(x_2)\Psi_A^*(x_1)) (\Psi_A(x_1)\Psi_B(x_2) \pm \Psi_B(x_2)\Psi_A(x_1))] \right\} = \quad (4.8.16)$$

$$= \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 \{ x_1^2 |\Psi_A(x_1)|^2 |\Psi_B(x_2)|^2 + x_1^2 |\Psi_B(x_2)|^2 |\Psi_A(x_1)|^2 \pm 0 \pm 0 \} \quad (4.8.17)$$

$$\langle x_1^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle x^2 \rangle_A + \frac{1}{2} \langle x^2 \rangle_B \quad (4.8.18)$$

Hasonlóképen:

$$\langle x_2^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle x^2 \rangle_A + \frac{1}{2} \langle x^2 \rangle_B \quad (4.8.19)$$

$$\langle x_1 x_2 \rangle = \int dx_1 \int dx_2 x_1 x_2 |\Psi(x_1 x_2)|^2 = \quad (4.8.20)$$

$$= \frac{1}{2} \int dx_1 \int dx_2 x_1 x_2 \{ (\Psi_A^*(x_1) \Psi_B^*(x_2) \pm \Psi_B^*(x_2) \Psi_A^*(x_1)) (\Psi_A(x_1) \Psi_B(x_2) \pm \Psi_B(x_2) \Psi_A(x_1)) \} = \quad (4.8.21)$$

$$= \frac{1}{2} \int dx_1 \int dx_2 \{ x_1 x_2 |\Psi_A(x_1)|^2 |\Psi_B(x_2)|^2 + x_1 x_2 |\Psi_A(x_1)|^2 |\Psi_B(x_2)|^2 \} \quad (4.8.22)$$

$$\{ \pm x_1 x_2 |\Psi_A(x_1)|^2 |\Psi_B(x_2)|^2 + \pm \Psi_A^*(x_1) \Psi_B(x_2) \Psi_B^*(x_2) \Psi_A(x_1) \pm x_1 x_2 \Psi_A^*(x_1) \Psi_B(x_2) \Psi_B^*(x_2) \Psi_A(x_1) \} \quad (4.8.23)$$

$$= \langle x \rangle_A \cdot \langle x \rangle_B \pm \frac{1}{2} |\langle x \rangle_{AB}|^2 \pm \frac{1}{2} |\langle x \rangle_{AB}|^2 \quad (4.8.24)$$

Ahol:

$$\langle x \rangle_{AB} = \int dx \Psi_A^*(x) \Psi_B(x) \quad (4.8.25)$$

Így:

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle_A + \langle x^2 \rangle_B - 2 \langle x_1 \rangle_A \cdot \langle x_2 \rangle_B \mp 2 |\langle x \rangle_{AB}|^2 \quad (4.8.26)$$

A különbség az egy pozitív szám, tehát határozottan tudjuk mondani, hogy mikor kapunk nagyobb, illetve kisebb értéket, mint a megkülönböztethető esetben. Fermionok esetén ez nagyobb, a bozonok esetén pedig kisebb.

Eszerint ez olyan, mintha a fermionok taszítanák egymást, nem szeretnek ugyanazon a helyen lenni, bozonok esetén meg kisebb lesz ez a távolság, ők szeretnek egy helyen lenni.

Ennek egyik érdekes alkalmazása a kovalens kötés megmagyarázása. Amikor szimmetrizálunk, akkor a bozonok esetén az átlagos távolság csökken, a részecskék bemennek középre, mintha vonzanák egymást. Ha pedig fermionok vannak, akkor eltávolodnak. Amikor középre mennek olyankor jön létre kötés.

De akkor valami nem stimmel, hiszen az elektronok fermionok, valamit nem vettünk figyelembe. Az elektronoknak van spinjük is, mégpedig feles. Ha kettő ilyen összeadunk, akkor két lehetőségünk van, a szinglet, illetve a triplet.

A triplet esetén szimmetrikus volt a hullámfüggvény, szinglet esetén pedig antiszimmetrikus. A teljes állapotvektornak kell antiszimmetrikusnak lennie, ami azt jelenti, hogyha a két elektron triplet állapotban van, akkor a spin rész szimmetrikus, tehát a térbeli résznek antiszimmetrikusnak kell lennie. Fordított esetben a spin rész lesz antiszimmetrikus, tehát a térbeli résznek szimmetrikusnak kell lennie. Ha viszont a térbeli rész szimmetrikus, akkor pont meg tud valósulni a kötés.

Nézzük meg ezt egy kicsit általánosabban, tehát mikor több részecskénk van és nem egy dimenziósak. Ilyenkor is sokszor jó közelítés, hogy a Hamilton-operátor külön-külön hat az egyes részecskékre, tehát felírható, mint operátorok összege.

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3 + \dots \quad (4.8.27)$$

Ezt úgy kell érteni, hogy az operátor hatása felírható úgy, hogy

$$(\hat{H}\Psi)(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \int d^3x'_1 \hat{H}_{x_1x'_1}^{(1)} \Psi(x'_1, x_2, \dots, x_n) + \dots \quad (4.8.28)$$

Ilyen esetben a  $\Psi$  felírható szorzatalakban:

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \Psi_1(\mathbf{x}_1) \cdot \dots \cdot \Psi_n(\mathbf{x}_n) \quad (4.8.29)$$

Ha erre hattatom a  $\hat{H}$ -t, akkor minden eleme csak egy helyre hat, ez n darab sajátértékegyenlethez fog vezetni és a teljes energia

$$E = \sum_i E_i \quad (4.8.30)$$

Atomfizikában ezt nevezik Hairee közelítésnek.

Ha azonosak a részecskék, akkor a felírásunk nem lesz jó, mert nem tudja a megfelelő szimmetriát, így ezt ki kell még egészíteni:

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \sum_p \delta_p \Psi_1(\mathbf{p}_1) \cdot \dots \cdot \Psi_n(\mathbf{p}_n) \quad (4.8.31)$$

$p$  sz összes permutáció és

$$\delta_p = \begin{cases} \text{bozon} & +1 \\ \text{fermion} & +1 \text{ páros } p \\ & -1 \text{ páratlan } p \end{cases} \quad (4.8.32)$$

Konkrétan fermionok esetén ezt lehet reprezentálni, ez egy determináns:

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \begin{vmatrix} \Psi_1(\mathbf{x}_1) & \Psi_1(\mathbf{x}_2) & \dots & \Psi_1(\mathbf{x}_n) \\ \Psi_2(\mathbf{x}_1) & \Psi_2(\mathbf{x}_2) & & \\ \vdots & & & \\ \Psi_n(\mathbf{x}_1) & & & \Psi_n(\mathbf{x}_n) \end{vmatrix} \quad (4.8.33)$$

Ez egy Slater determináns. Ezen a nyelven jól látszik az, hogy mivel egy ilyen determináns egy csomó esetben nulla, senki nem szerepelhet kétszer egy oszlopban, vagy egy sorban. Azaz semelyik két részecske nem lehet ugyanabban az állapotban. Ez a Pauli-elv. Ha mégis így lenne, akkor azok cseréjére a hullámfüggvény szimmetrikus lenne, de mivel egyben antiszimmetrikusnak is kell lennie a teljes állapotfüggvénynek, így ez csak a nulla lehet.

Bozonoknál ilyen nincsen, lehet több részecske ugyanabban az állapotban. Sőr, annyira így van, hogy akár makroszkopikusan sok részecske is lehet. Ezt a jelenséget nevezik Bose-Einstein kondenzátumnak. Ezt mára már kísérletileg is megfigyelték.

Ennek egyik következménye például a periódusos rendszer felépítése. Lényegében egy hidrogénszerű spektrumból és a Pauli-elvből következik.

Van egy atommagunk, aminek van valami töltése, odarakunk mellé ugyanannyi elektront és a kérdés az, hogy milyen állapotban lesz a rendszer, hol lesznek ezek az elektronok. Világos, ha egy darab elektront teszünk be, az a hidrogén atom, aminek a legalacsonyabb

energiás állapota az alapállapot. Ha beteszek még egy elektront és első közelítésben ezek egymással nem hatnak kölcsön, akkor mind a kettő lehet még az alapállapotban, csak eltérő spinnel

Egy harmadik elektront már máshova kell tenni,  $n = 1$  esetén már nem férnek el többen, a következő szintre kell tenni az új elektront.

Általában azt kellene csinálni, hogy megoldjuk a kvantummechanikát ezekre a sokrészeske rendszerekre. De most csak közelítünk. Egy elektront figyelünk és úgy gondolunk rá, hogy őt kivesszük és az a mag plusz a többi elektron terét érzi. Ez jó közelítéssel centrális potenciál lesz, de nem Coulomb. Centrális potenciálban tudjuk hogy megy az energia, vannak a kvantumszámok, de az energia már nem csak az  $n$ -tól fog függni, hanem az  $l$ -től is, tipikusan  $l$ -lel nőni fog az energia. Még az is előfordulhat, hogy valamilyen  $n, l$ -nél már nagyobb az energia, mint a következő  $n$ -nél. Az persze továbbra is igaz, hogy egy adott  $n$ -hez  $2n^2$  állapot van (kettő a spinből jön).

Ebből kiszámolható, hogy hogyan fognak beöltödni az állapotok. Elsőként az első főkvantumszám, majd a második főkvantumszám és a harmadik főkvantumszámnál fog először előfordulni, hogy már nagyobb a mellékvantumszámból jövő energia és így tovább.

#### 4.8.2. Tükrözések

Nagyon általánosan keveset tudunk mondani. Háromféle tükrözésről szoktunk beszélni:

- paritás (P), tértükrözés:  $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}; t \rightarrow t$ .
- időtükrözés (T):  $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}; t \rightarrow -t$ .
- töltés konjugálás (C): részecske  $\rightarrow$  antirészecske

T: Időnek az irányát fordítja meg, antiunitér módon kell ábrázolni.

P: Ha szimmetria, akkor létezik hozzá  $\hat{P}$  unitér operátor, ami az állapotokon hat és az a Hamilton-operátorral kommutálni fog. Ilyenkor létezik közös sajátvektorrendszer, vagyis van  $\hat{p}$  sajátállapot. Ennek érdekes következménye, hogy minden energiasajátállapotot megtudunk úgy választani, hogy egyben paritásajátállapot is legyen. Ha nem degeneráltak az energiasajátállapotok, akkor a lehetből kötelező lesz. Ezt könnyen meg is lehet mutatni, mert minden  $\Psi_i$ -re, amelyre  $\hat{H}\Psi_i = E_i\Psi_i$ , arra  $\hat{H}\hat{P}\Psi_i = \hat{P}\hat{H}\Psi_i = E_i\Psi_i$ , ez csak akkor lehet, ha  $\hat{P}\Psi_i = \alpha\Psi_i$ . Világos, hogy az  $\alpha$  csak  $\pm 1$  lehet.

Harmonikus oszcillátor spektruma egy dimenzióban nem degenerált, ebből következik, hogy minden  $\Psi_i$  páros, vagy páratlan.

Felmerülhet az a kérdés, hogy amikor a hidrogénatom állapotait jellemezzük, akkor az energia tipikusan nem függött  $l$ -től, akkor a két különböző  $l$ -hez tartozó állapotok miért lesznek határozottak? Miért nem keveredik?

A hidrogénatomnak a Hamilton-operátora kommutál a paritással, akkor is, hogy ha minden létező effektust figyelembe veszünk. Ha minden effektust figyelembe veszünk, akkor viszont már nem lesznek degeneráltak az energiaszintek, azaz mindenki  $\hat{P}$ -nek is sajátállapota. Viszont a  $\Psi$ -k meg úgy mennek, hogy:

$$\Psi \sim R(r)Y_l^m \quad (4.8.34)$$

Mivel  $Y$  paritása olyan, hogy  $(-1)^l$ -nel megy, ezért nem tudnak keveredni, hiszen paritásajátállapotnak is lennie kell egyszerre.

1956-ban kiderült, hogy  $P$  nem szimmetriája a természetnek. Konkrétan a gyenge kölcsönhatásnak nem szimmetriája. Ezek a jelenségek, mint a kaon-bomlás, béta-bomlás maximálisan sértik a paritást.

Azonban ha nem csak tértükrözök, de hozzáveszem ehhez a  $C$ -t, tehát egyszerre tükrözöm a teret és mindenkihez hozzárendelem az antirészecskéjét az úgy tűnt megmenti a helyzetet, az már szimmetria. Sajnos ez is sérül, sokkal precízebb analízisből kiderül.

Az viszont mint a mai napig úgy tűnik, hogy ha mind a három tükrözést végrehajtom, az már tényleg szimmetriája a természetnek. Ebből azonban következik, hogy  $T$  az nem szimmetria.

## 5. Közelítő módszerek

Sajnos nagyon kevés egzaktul megoldható probléma létezik a kvantummechanikában. Meg lehet oldani 1-2 dimenziós problémákat, a harmonikus oszcillátort, illetve a hidrogén atomot, de ennél sokkal többet nem tudunk mondani.

Numerikusan sem olyan egyszerű ezeket a dolgokat kiszámolni.

Éppen ezért kellenek a közelítő módszerek.

### 5.1. Időfüggetlen perturbációszámítás

Az a lényege, hogy van valami rendszerünk, amit meg tudunk oldani. Tehát legyen a  $\hat{H}^0$  aminek ismerjük a sajátállapotait és sajátenergiáit, mint mondjuk a harmonikus oszcillátor, vagy a hidrogénatom.

Veszünk egy másik Hamilton-operátort, ami csak egy kicsit tér el ettől. A kérdés az, hogy mi történik az energiákkal, a sajátállapotokkal, ha  $\hat{H}^0$  egy "kicsit" megváltozik. Ezt úgy tudjuk kezelhetővé tenni, hogy a másik operátorból kiemelünk egy  $\lambda$ -t, aminek a kicsiségével írjuk le azt, hogy kicsit változtatunk.

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \lambda \hat{H}' \quad (5.1.1)$$

Tegyük fel, hogy  $E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$ , illetve  $\Psi_n = \Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)} + \lambda^2 \Psi_n^{(2)} + \dots$ . Nemes egyszerűséggel írjuk ezt vissza!

$$\begin{aligned} & (\hat{H}^0 + \lambda \hat{H}') [|\Psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\Psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\Psi_n^{(2)}\rangle + \dots] = \\ & = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots) [|\Psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\Psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\Psi_n^{(2)}\rangle + \dots] \end{aligned} \quad (5.1.2)$$

Ezt az egyenletet kell rendezgetni, egy adott rendig. A vezető rend a  $\lambda$  lesz.

$$\hat{H}^0 |\Psi_n^{(0)}\rangle + \lambda \hat{H}^0 |\Psi_n^{(1)}\rangle + \lambda \hat{H}' |\Psi_n^{(0)}\rangle = E_n^0 |\Psi_n^{(0)}\rangle + \lambda E_n^0 |\Psi_n^{(0)}\rangle + \lambda E_n^1 |\Psi_n^{(0)}\rangle \quad (5.1.3)$$

Szorozzunk balról  $\langle \Psi_n^{(0)} |$ -nel!

$$\langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}^0 | \Psi_n^{(1)} \rangle + \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \Psi_n^{(0)} \rangle = E_n^0 \langle \Psi_n^{(0)} | \Psi_n^{(1)} \rangle + E_n^1 \langle \Psi_n^{(0)} | \Psi_n^{(0)} \rangle \quad (5.1.4)$$



$$\langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}^0 | \Psi_n^{(1)} \rangle = (\Psi_n^{(0)}, \hat{H}^0 \Psi_n^{(1)}) = (\hat{H}^0 \Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(1)}) = E_n^0 \langle \Psi_n^{(0)} | \Psi_n^{(1)} \rangle \quad (5.1.5)$$

Ebből megkapjuk az első eredményünket:

$$E_n^1 = \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \Psi_n^{(0)} \rangle \quad (5.1.6)$$

Ez persze csak akkor érvényes, ha nem degeneráltak az energia sajátállapotok. Ahhoz, hogy ezt lássuk vegyük a sajátállapotokat! Tehát  $|\Psi_n^{(0)}\rangle$ -ra hajtunk, ehhez nézzük a (5.1.3) egyenletet!

$$(\hat{H}^0 - E_n^0) |\Psi_n^{(1)}\rangle = -(\hat{H}' - E_n^1) |\Psi_n^{(0)}\rangle \quad (5.1.7)$$

$|\Psi_n^{(0)}\rangle$  egy bázis, fejtsük ki rajta  $|\Psi_n^{(1)}\rangle$ -et!

$$|\Psi_n^{(1)}\rangle = \sum_m c_{nm} |\Psi_n^{(0)}\rangle \quad (5.1.8)$$

$$\sum_m (\hat{H}^0 - E_n^0) c_{nm} |\Psi_n^{(0)}\rangle = -(\hat{H}' - E_n^1) |\Psi_n^{(0)}\rangle \quad (5.1.9)$$

Ha  $n = m$ , akkor  $(\hat{H}^0 - E_n^0) |\Psi_n^{(0)}\rangle = 0$ , azaz  $\sum_m = \sum_{n \neq m}$ .

Most szorozzuk az egészet balról  $\langle \Psi_l^{(0)} |$ -lel!

$$\sum_m c_{nm} [\langle \Psi_l^{(0)} | \hat{H}^0 | \Psi_m^{(0)} \rangle - E_n^0 \langle \Psi_l^{(0)} | \Psi_m^{(0)} \rangle] = -\langle \Psi_l^{(0)} | \hat{H}' | \Psi_n^{(0)} \rangle + E_n^1 \langle \Psi_l^{(0)} | \Psi_n^{(0)} \rangle \quad (5.1.10)$$

$$c_{nl} (E_l^0 - E_n^0) = -\langle \Psi_l^{(0)} | \hat{H}' | \Psi_n^{(0)} \rangle + E_n^1 \delta_{ln} \quad (5.1.11)$$

2 eset lehetséges:

- $l = n$

$$E_n^1 = \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \Psi_n^{(0)} \rangle \quad (5.1.12)$$

- $l \neq n$

$$c_{nl} (E_l^0 - E_n^0) = -\langle \Psi_l^{(0)} | \hat{H}' | \Psi_n^{(0)} \rangle \quad (5.1.13)$$

Ha degenerált a spektrum, tehát létezik olyan  $l \neq n$ , hogy  $E_l^0 = E_n^0$ , akkor a bal oldal nulla, a második esetben, azonban a jobb oldal már nem feltétlenül nulla. Ekkor  $c$  ezt nem tudja helyrehozni.

Most tegyük fel, hogy nincs degeneráció:

$$c_{nl} = \frac{\langle \Psi_l^{(0)} | \hat{H}' | \Psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^0 - E_l^0} \quad (5.1.14)$$

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_{l \neq n} \frac{\langle \Psi_l^{(0)} | \hat{H}' | \Psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^0 - E_l^0} \Psi_l^{(0)} \quad (5.1.15)$$

Vizsgáljuk a másodrendű korrekciót  $\lambda^2$  tagokig.

$$\hat{H}^0 |\Psi_n^{(2)}\rangle + \hat{H}' |\Psi_n^{(1)}\rangle = E_n^0 |\Psi_n^{(2)}\rangle + E_n^1 |\Psi_n^{(1)}\rangle + E_n^2 |\Psi_n^{(0)}\rangle \quad (5.1.16)$$

Ismét szorozzunk balról  $|\Psi_n^{(0)}\rangle$ -nal!

$$\langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}^0 | \Psi_n^{(2)} \rangle + \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \Psi_n^{(1)} \rangle = E_n^0 \langle \Psi_n^{(0)} | \Psi_n^{(2)} \rangle + E_n^1 \langle \Psi_n^{(0)} | \Psi_n^{(1)} \rangle + E_n^2 \langle \Psi_n^{(0)} | \Psi_n^{(0)} \rangle \quad (5.1.17)$$

Mivel most a nem degenerált eseteket nézzük, így:

$$E_n^2 = \sum_{l \neq n} \frac{|\langle \Psi_l^{(0)} | \hat{H}' | \Psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^0 - E_l^0} \quad (5.1.18)$$

Ezt azért nem annyira egyszerű kiszámolni. Ismerni kell az összes állapotot és a szummákat is el kell tudni végezni. Két esetben könnyű ezt meghatározni

- Ha  $E_n^0 - E_l^0 \approx$  konstans minden  $l$ -re, amelyre  $\langle \Psi_l^{(0)} | \hat{H}' | \Psi_n^{(0)} \rangle \neq 0$ . Ekkor a nevező kiemelhető.
- Ha kevés olyan  $l$  van, amelyre a mátrixelem nem nulla.

Tekintsük példaként a végtelen mély potenciálgödört. Ismerjük az alapállapotot és az energiákat:

$$\Psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad E_n^0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 \quad (5.1.19)$$

A legegyszerűbb elképzelhető perturbáció: emeljük meg a gödör fenekét egy  $V_0$  konstans potenciállal:  $\hat{H}' = V_0$ .

$$E_n^1 = \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \Psi_n^{(0)} \rangle = \int_0^a \Psi_n^{(0)} V_0 \Psi_n^{(0)} dx = V_0 \int_0^a |\Psi_n^{(0)}|^2 dx = V_0 \quad (5.1.20)$$

Tehát első rendben  $E = E_n^0 + V_0$ , éppen ezt vártuk (ez már az egzakt megoldás).

Most legyen a potenciál olyan, hogy:

$$\hat{H}' = V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{ha } x < a/2 \\ 0 & \text{ha } x > a/2 \end{cases} \quad (5.1.21)$$

Ekkor a keresett energia:

$$E_n^1 = \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \Psi_n^{(0)} \rangle = \int_0^a \Psi_n^{(0)} V(x) \Psi_n^{(0)} dx = V_0 \int_0^{a/2} |\Psi_n^{(0)}|^2 dx = \frac{V_0}{2} \quad (5.1.22)$$

### 5.1.1. Degenerált eset

Nem degenerált eset általában csak 1 dimenziós problémáknál van, így több dimenzióban tárgyaljuk. A problémás lépés az volt, hogy

$$c_{nl} (E_n^0 - E_l^0) = \langle \Psi_l^{(0)} | \hat{H}' | \Psi_n^{(0)} \rangle \quad n \neq l \quad (5.1.23)$$

Csak úgy lesz konzisztens, ha a jobb oldal is nulla. Lehetséges ez? Vegyük észre, hogy ha  $E_n^0 = E_l^0$ , miközben  $n \neq l$ , akkor megfelelő  $|\Psi_{n,l}^{(0)}\rangle$ -k nem egyértelműek, tetszőleges lineáris kombinációjuk is sajátállapot. Válasszuk ezt meg úgy, hogy a  $\langle \Psi_l^{(0)} | \hat{H}' | \Psi_n^{(0)} \rangle$  mátrixelem diagonális legyen.

Legyen tehát  $|\Phi_i\rangle$  ( $i = 1, \dots, k$ ) az összes olyan állapot, melyre

$$\hat{H}^0 |\Phi_i\rangle = E |\Phi_i\rangle \quad (5.1.24)$$

$E$ -nek most nincs indexe, kiválasztottunk egy darab energiát, ami  $k$  szorosan degenerált.  $|\Phi_i\rangle$  így  $k$  darab egymásra merőleges állapot.

Definiálunk egy mátrixot:

$$W_{nm} = \langle \Phi_m | \hat{H}' | \Phi_n \rangle \quad (5.1.25)$$

Mivel  $\hat{H}'$  hermitikus, így  $W_{nm}$  is az.  $n$  és  $m$  1-től  $k$ -ig megy. Úgy szeretnénk a  $\Phi$ -ket megválasztani, hogy ez a mátrix legyen diagonális. Diagonalizálni kell ezt a hermitikus mátrixot, szerencsére ez mindig megtehető, ráadásul egyértelműen.

Létezik neki  $k$  darab sajátértéke és sajátvektora, amelyek teljesítik a következőt:

$$\sum_{n=1}^k W_{nm} e_n^i = \Delta^i e_m^i \quad (5.1.26)$$

Ezek az  $e^i$ -k ortonormált rendszert alkotnak, hiszen  $W_{nm}$  egy hermitikus mátrix, azaz teljesül az, hogy

$$\sum_n e_n^{i*} e_n^j = \delta_{ij} \quad (5.1.27)$$

Innen már megtudjuk konstruálni a bázist. Legyen  $|\chi_i\rangle = \sum_{n=1}^k e_n^i |\Phi_n\rangle$ . Továbbra is teljesül, hogy  $\langle \chi_i | \chi_j \rangle = \delta_{ij}$ . Ezt most helyettesítsük be!

$$\langle \chi_i | \hat{H}' | \chi_j \rangle = \left\langle \sum_{n=1}^k e_n^i \Phi_n \left| \hat{H}' \right| \sum_{m=1}^k e_m^j \Phi_m \right\rangle = \sum_{nm} e_n^{i*} e_n^j \langle \Phi_n | \hat{H}' | \Phi_m \rangle = \quad (5.1.28)$$

$$= \sum_{nm} e_n^{i*} e_n^j W_{nm} = \sum_n e_n^{i*} \underbrace{\sum_m W_{nm} e_m^j}_{\Delta^j e_n^j} = \sum_n e_n^{i*} \Delta^j e_n^j = \Delta^j \delta_{ij} \quad (5.1.29)$$

Az új bázisban ez diagonális. Tehát ha áttérünk a  $\chi$ -kre, akkor azt szokták mondani, hogy ez a "jó" sajátvektorrendszer. Tehát a problémás egyenlet ezekkel már nem lesz problémás. Ha nulla van a bal oldalon, akkor nulla van a jobb oldalon is.

Lesz  $k$  darab "jó" sajátállapot tehát, ezekre teljesül, hogy

$$E_i^1 = \langle \chi_i | \hat{H}' | \chi_i \rangle = \Delta^i \quad (5.1.30)$$

Amikor a nulladik korrekcióban, perturbáció nélkül degeneráltak voltak az energiasajátértékek, akkor, már első korrekcióban előfordulhat, hogy nem lesz degenerált. Erre szokták azt mondani, hogy a perturbáció feloldja a degenerációt. Kezdetben degenerált energiaszintek perturbáció hatására könnyen lehet, hogy nem lesznek degeneráltak.

Összegezve:

- Meg kell találni a "jó" bázist, vagyis azokat a  $|\chi_i\rangle$  állapotokat, amelyekre  $W_{nm}$  diagonális.
- Az energiakorrekciók éppen  $W$  sajátértékei.

Van egy tétel, ami egyszerűbbé teszi az életet. Nem mindig kell megkeresni  $W$ -t. Ha találunk egy olyan  $\hat{A}$  hermitikus operátort, úgy, hogy  $[\hat{A}, \hat{H}^0] = [\hat{A}, \hat{H}'] = 0$  és  $\hat{A}|\Phi_i\rangle = a_i|\Phi_i\rangle$ ,  $\hat{H}^0|\Phi_i\rangle = E|\Phi_i\rangle$ , akkor  $a_i \neq a_j$ . Ilyen operátor például centrális potenciálban  $\hat{J}_3$ . Ilyenkor nem kell diagonalizálni,  $\hat{A}$  éppen a jó bázis.

$$0 = \langle \Phi_i | [\hat{A}, \hat{H}'] | \Phi_j \rangle = \langle \Phi_i | \hat{A} \hat{H}' | \Phi_j \rangle - \langle \Phi_i | \hat{H}' \hat{A} | \Phi_j \rangle = \quad (5.1.31)$$

$$= a_i \langle \Phi_i | \hat{H}' | \Phi_j \rangle - a_j \langle \Phi_i | \hat{H}' | \Phi_j \rangle = (a_i - a_j) \langle \Phi_i | \hat{H}' | \Phi_j \rangle \quad (5.1.32)$$

És mivel  $a_i \neq a_j$ , így  $\langle \Phi_i | \hat{H}' | \Phi_j \rangle = 0$ .

## 5.2. Hidrogén atom finomfelhasadása

Két darab hatást szokás figyelembe venni, az egyik a relativisztikus korrekció, a másik az  $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$  kölcsönhatás. Ezekből az derül ki, hogy még előtte a hidrogén atom energiaszintjei  $l, j$ -ben degeneráltak voltak, finomfelhasadás után már függni fognak ezektől is.

Egy másik effektus, ha nem a hidrogénatomot nézzük, hanem valami nagyobb rendszámú atomot, akkor a legkülső elektron egy centrális, de nem Coulomb potenciált fog érezni, tehát már  $l$ -től is függni fognak az energiák.

Ezen hatások után sem fog függni  $m$ -től, az szerint mindig van degeneráció.

### 5.2.1. Zeeman-effektus

Energiaszintek módosulása külső, homogén mágneses tér esetén. A számolhatóság kedvéért meg kell különböztetni két esetet  $\mathbf{B}$  nagyságától függően.

- $\Delta E_{\mathbf{B}} \ll \Delta E_{finom}$  Gyenge a mágneses tér, csak  $m$  kvantumszám szerint lesz degeneráció.
- $\Delta E_{\mathbf{B}} \gg \Delta E_{finom}$  Erős mágneses tér, már  $m$  és  $j$  szerint lesz degeneráció.

A két esetben más a degeneráció.

Általánosán:

$$\hat{H}^0 = \hat{H}^0 + \Delta\hat{H}_{finom} + \Delta\hat{H}_{\mathbf{B}} \quad (5.2.1)$$

A két esetben számolásunk során vagy csak az egyik hatás dominál, vagy a másik, a mágneses tér erősségétől függően.

Első esetben mi lesz a perturbáció? Ha van egy külső mágneses tér, akkor a kölcsönhatás az a mágneses tér és a mágneses momentum szorzata:  $\Delta\hat{H} = -\mu\mathbf{B}$ , ahol  $\mu = \mu_l + \mu_s$ .

$$\mu_l = -\frac{e}{2m_e}\hat{\mathbf{L}} \quad (5.2.2)$$

$$\mu_s = -\frac{e}{2m_e}g\hat{\mathbf{S}} \quad (5.2.3)$$

ahol  $g$  az elektron giromágneses faktora.

$$\Delta\hat{H} \left( \frac{e}{2m_e}\hat{\mathbf{L}} + \frac{e}{2m_e}g\hat{\mathbf{S}} \right) \mathbf{B} \quad (5.2.4)$$

A maximális bázis, amit választhattunk:

$$\hat{H}^0 |njlm\rangle = E |njlm\rangle \quad (5.2.5)$$

Degeneráció csak  $m$  szerint van. Ez azt jelenti, hogy ha lefixálom  $n, j, l$ -t, akkor az energia egyértelmű.

$$W_{mm'} = \langle njlm' | \Delta\hat{H} | njlm \rangle = \frac{e}{2m_e} \langle njlm' | (\hat{\mathbf{L}} + g\hat{\mathbf{S}}) \mathbf{B} | njlm \rangle \quad (5.2.6)$$

Használjuk ki Wigner-Eckart tétel következményét vektorokra. Ha van két vektorunk, akkor ezeknek a mátrixelemei két impulzusmomentum-sajátállapot között párhuzamosak és az arányossági tényező pont a Clebsh-Gordon együtthatók. Azt fogjuk kihasználni, hogy ha kiszámoljuk a spin és pályaimpulzusmomentum mátrixelemeit, majd a teljes impulzusmomentum mátrixelemeit, akkor ezek csak egy konstans szorzótól fognak eltérni egymástól, és az nem függhet  $m$ -től és az  $m'$ -től.

$$\langle njlm' | (\hat{\mathbf{L}} + g\hat{\mathbf{S}}) | njlm \rangle = g_{njl} \langle njlm' | \hat{\mathbf{J}} | njlm \rangle \quad (5.2.7)$$

Ezeket a  $g_{njl}$  számokat Landé-faktoroknak nevezzük. Beszorunk  $\hat{\mathbf{J}}$ -vel. Ezt megtehetjük, mivel

$$[\hat{J}_i, \hat{J}^2] = [\hat{J}_i, \hat{L}^2] = [\hat{J}_i, \hat{H}^0] = 0 \quad (5.2.8)$$

Azaz,  $\hat{J}_i |njlm\rangle$  továbbra is sajátállapot, méghozzá olyan, ahol  $n, j, l$  ugyanaz a kvantumszám, csak  $m$  változik, tehát ezeknek tetszőleges lineáris kombinációja is állapot.

Tehát a megoldandó probléma:

$$\langle njlm' | (\hat{\mathbf{L}} + g\hat{\mathbf{S}}) \hat{\mathbf{J}} | njlm \rangle = g_{njl} \langle njlm' | \hat{J}^2 | njlm \rangle \quad (5.2.9)$$

Jobb oldalt kapásból ki tudjuk számolni:

$$g_{njl} \langle njlm' | \hat{J}^2 | njlm \rangle = g_{njl} \hbar^2 j(j+1) \delta_{mm'} \quad (5.2.10)$$

A bal oldal sem sokkal bonyolultabb, csak tudni kéne hozzá a skalárszorzatokat. Van összefüggésünk a három impulzusmomentum-operátor között, ezeket kell átrendezni:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{S}} &= \hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{L}} & \hat{S}^2 &= \hat{J}^2 + \hat{L}^2 - 2\hat{J}\hat{L} & \hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{L}} &= \frac{1}{2} \left( \hat{J}^2 + \hat{L}^2 - \hat{S}^2 \right) \\ \hat{\mathbf{L}} &= \hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{S}} & \hat{L}^2 &= \hat{J}^2 + \hat{S}^2 - 2\hat{J}\hat{S} & \hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{S}} &= \frac{1}{2} \left( \hat{J}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2 \right)\end{aligned}\quad (5.2.11)$$

Ezeknek mind ismerjük a sajátértékeit:

$$\hat{J}^2 \rightarrow j(j+1) \quad \hat{L}^2 \rightarrow l(l+1) \quad \hat{S}^2 \rightarrow s(s+1) \quad (5.2.12)$$

Ezekkel az információkkal felvértézve írjuk fel a bal oldalt, figyelembe véve, hogy elektronról van szó, tehát  $s = 1/2$ !

$$\frac{\hbar^2}{2} \left[ j(j+1) + j(j+1) - \frac{3}{4} + \left( j(j+1) - l(l+1) + \frac{3}{4} \right) g \right] \delta_{mm'} = \hbar^2 g_{njl} j(j+1) \delta_{mm'} \quad (5.2.13)$$

Ebből meg is vannak a  $g_{njl}$  együtthatók:

$$g_{njl} = 1 + (g-1) \frac{j(j+1) - l(l+1) + \frac{3}{4}}{2j(j+1)} \quad (5.2.14)$$

Ha  $g$  egy lenne, akkor  $g_{njl}$  egzaktul 1 lenne. Régen ezt így is csinálták, ez volt a normális Zeeman effektus. Ha  $g \neq 1$  akkor az az anomális Zeeman effektus. Látható, hogy a Landé-együtthatók nem függnek  $n$ -től.

A mátrixelem, amire szükségem van:

$$\mathbf{B} \langle n j l m' | (\hat{\mathbf{L}} + g\hat{\mathbf{S}}) | n j l m \rangle = g_{jl} \mathbf{B} \langle n j l m' | \hat{\mathbf{J}} | n j l m \rangle \quad (5.2.15)$$

A jobb oldalt fogjuk kiszámolni, az egyszerűbb lesz,  $\mathbf{B}$ -t be lehet vinni a szendvicsbe:

$$g_{jl} \langle n j l m' | \mathbf{B} \hat{\mathbf{J}} | n j l m \rangle \quad (5.2.16)$$

Ez nem feltétlenül diagonális mátrix, diagonalizálni kellene. Erre két lehetőségünk adódik: ha  $A$  éppen  $\hat{\mathbf{J}}$ -nek  $\mathbf{B}$  irányú komponense, akkor az azt jelenti, hogy  $A$  sajátállapotai lesznek a "jó" bázis.

A másik lehetőség, hogy ügyesen megválasztjuk a bázist:  $\mathbf{B} \parallel \mathbf{e}_z$ , mert akkor  $\mathbf{B}\hat{\mathbf{J}} = B\hat{J}_3$ .

Ekkor  $W$  automatikusan diagonális:

$$W_{mm'} = \frac{e}{2m_e} g_{jl} \langle n j l m' | B\hat{J}_3 | n j l m \rangle = \frac{eB\hbar}{2m_e} m g_{jl} \delta_{mm'} \quad (5.2.17)$$

És ez máris diagonális.

$$\Delta E_{\mathbf{B}} = \frac{eB\hbar g_{jl}}{2m_e} m \quad m = -j, \dots, +j \quad (5.2.18)$$

Azaz minden energiaszint  $2j + 1$  energiára hasad fel.

Nézzük most meg mi történik abban az esetben, amikor erős a mágneses tér! Ekkor az energia csak  $n$ -től és  $l$ -től függ. Érdekes áttérni másik bázisra. A szokásos bázis az, mikor egyszerre sajátállapota  $\hat{H}^0$ -nak,  $\hat{L}^2$ -nek,  $\hat{L}_3$ -nak és  $\hat{S}_3$ -nak. Ehelyett át lehet térni arra a bázisra, amikor az állapotokat tudjuk jellemezni  $l$ -lel,  $n$ -nel,  $m_l$ -lel illetve  $m_s$ -sel.

Ekkor a mátrixunk, amit ki kell számolnunk:

$$W_{m'_l m'_s m_l m_s} = \frac{e}{2m_e} \mathbf{B} \left\langle n l m'_l m'_s \left| \left( \hat{\mathbf{L}} + g \hat{\mathbf{S}} \right) \right| n l m_l m_s \right\rangle \quad (5.2.19)$$

$\mathbf{B} \parallel \mathbf{e}_z$

$$\frac{eB}{2m_e} \left\langle n l m'_l m'_s \left| \left( \hat{L}_3 + g \hat{S}_3 \right) \right| n l m_l m_s \right\rangle = \frac{\hbar e B}{2m_e} (m_l + g m_s) \delta_{m'_l m_l} \delta_{m'_s m_s} \quad (5.2.20)$$

Ezt szokás nevezni Paschen-Back effektusnak is.

$$\Delta E_{\mathbf{B}} = \frac{\hbar e B}{2m_e} (m_l + g m_s) \quad (5.2.21)$$

### 5.2.2. Stark-effektus

Homogén elektromos teret kapcsolunk be, ettől az energiaszintek felhasadnak.

Ha  $-e$  töltése van a részecskének, akkor:

$$\Delta \hat{H} = -e \Phi(\mathbf{r}) \quad (5.2.22)$$

Mivel  $\mathbf{E} = -\nabla \Phi$  homogén, legyen  $\Phi = -\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$ . Az elektromos tér legyen párhuzamos a  $z$  tengellyel:

$$\Delta \hat{H} = e E \hat{x}_3 \quad (5.2.23)$$

Ez kommutál a  $\hat{J}_3$ -mal. Különböző  $m$ -mek között nem lesz mátrixelem. Milyen elemeket kell majd kiszámítani?

$$e E \langle n j' l' m' | \hat{x}_3 | n j l m \rangle \quad (5.2.24)$$

Van egy érdekes tulajdonsága  $\hat{x}_3$  operátornak, paritása negatív. Vagyis a paritás operátor hatása  $\hat{x}_3$ -ra az éppen az ellentettje. A paritás hatása azon az állapoton, hogy  $\hat{x}_3 |n j l m\rangle$ , az éppen a mínusz egyszerese annak, mintha az eredetire hattatnám a paritást.  $|n j l m\rangle$  paritása  $(-1)^l$ -nel megy.

$$\hat{p} \hat{x}_3 \hat{p} |n j l m\rangle = \hat{p} \hat{x}_3 \hat{p} (-\hat{p} |n j l m\rangle) = \hat{p} \hat{x}_3 |n j l m\rangle \quad (5.2.25)$$

Ebből az következik, hogy ha  $l = l'$ , akkor a kettő szorzata nulla lesz, tehát a következő mátrixelem nulla lesz:

$$W_{j' l' m' j l m} = \langle n j' l' m' | \hat{x}_3 | n j l m \rangle = 0 \quad (5.2.26)$$

Ez nehezíti az életet, mert ez azt jelenti, hogy ha az energia függ az  $l$ -től, akkor nincs elsőrendű korrekció, legalább másodrendig kell menni. Azt meg nem akarjuk, mert

az bonyolult. Keressünk olyan esetet, mikor az energia nem függ az  $l$ -től. Van ilyen, szerencsére, ez pedig pont a hidrogén atom.

Itt is két szélsőséges esetet fogunk megvizsgálni, ha gyenge a tér a finomfelhasadáshoz képest és amikor erős. Kezdjük a vizsgálódást gyenge teret feltételezve, ilyenkor az energia  $j$ -től is függ. Ez azt jelenti, hogy  $j$ -k terén nem lesz szükség diagonalizációra.

$$eE \langle njl'm' | \hat{x}_3 | njlm \rangle \quad (5.2.27)$$

Ez csak akkor lesz nem nulla, ha  $l \neq l'$  és mivel az első tag paritása  $(-1)^{l'}$ , a második tag paritása  $(-1)^l$  és  $\hat{x}_3$  mindezt középen megfordítja ezért muszáj, hogy  $l' - l$  páratlan legyen, különben más lenne a paritás a két oldalon.

Ha  $s = \frac{1}{2}$ , ezért  $l = j \pm \frac{1}{2}$ . Ez azt jelenti, hogy egyértelmű, hogy csak két mátrixelem jöhet szóba:

$$eE \left\langle njj + \frac{1}{2}m' \left| \hat{x}_3 \right| njj - \frac{1}{2}m \right\rangle \quad (5.2.28)$$

Illetve:

$$eE \left\langle njj - \frac{1}{2}m' \left| \hat{x}_3 \right| njj + \frac{1}{2}m \right\rangle \quad (5.2.29)$$

Ez a két mátrixelem egymásnak pont komplex konjugáltjai.

- $n = 1$ , akkor  $l = 0$  lehet csak, ilyenkor nincs elsőrendű korrekció, mivel nem lehet  $l \neq l'$ .
- $n = 2$ , akkor két lehetőség van. Lehet a  $j = \frac{1}{2}$  ez elő tud úgy állni, hogy az  $l = 0$ , vagy  $l = 1$ , illetve lehet  $j = \frac{3}{2}$ , de ekkor  $l$  csak egyféle lehet, tehát megint nincs effektus.

Ezért csak a második főkvantumszámmal foglalkozunk és azt a konkrét mátrixelemet kell kiszámolnunk, hogy:

$$\left\langle 2\frac{1}{2}0 \pm \frac{1}{2} \left| \hat{x}_3 \right| 2\frac{1}{2}1 \pm \frac{1}{2} \right\rangle \quad (5.2.30)$$

Ennek meghatározásához ismerni kell, hogy mik ezek az állapotok. Az  $\hat{x}_3$  operátor csak a koordináta térben hat. Ez a hullámfüggvény olyan, amikor a  $j$  az, ami fix, ez spinösszeadás.

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{L}} \quad (5.2.31)$$

$\hat{J}^2$  és  $\hat{J}_3$  közös sajátállapotai:

$$|jlm\rangle = \sum_{m_l m_s} C_{l\frac{1}{2}}(j m m_l m_s) \left| j m_l \frac{1}{2} m_s \right\rangle \quad (5.2.32)$$

Igazából csak 1-1 tag van a két oldalon. Konkrétan is felírhatjuk ezt mind a két esetre:

- $l = 0, j = \frac{1}{2}$

$$\left| \frac{1}{2}0 \pm \frac{1}{2} \right\rangle = C_{0\frac{1}{2}} \left( \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}0 \pm \frac{1}{2} \right) \left| 00\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle \quad (5.2.33)$$

$C_{0\frac{1}{2}}$  muszáj, hogy 1 legyen.



- $l = 1, j = \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned} m_l = 0 & & m_s = \pm \frac{1}{2} & & m = \pm \frac{1}{2} \\ m_l = \pm 1 & & m_s = \mp \frac{1}{2} & & m = \pm \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (5.2.34)$$

Két tagunk lesz:

$$\left| \frac{1}{2} 1 \pm \frac{1}{2} \right\rangle = C_{1\frac{1}{2}} \left( \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} 0 \pm \frac{1}{2} \right) \left| 1 0 \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle + C_{1\frac{1}{2}} \left( \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \pm 1 \mp \frac{1}{2} \right) \left| 1 \pm 1 \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right\rangle \quad (5.2.35)$$

$C_{1\frac{1}{2}} = \mp \frac{1}{\sqrt{3}}$ . Mivel az  $\hat{x}_3$  operátor  $\hat{L}_3$ -mal kommutál, az  $m_l$  értéke nem változhat meg. Mivel az mindig nulla volt, ezért a második tag nem fog járulékot adni.

$$eE \left\langle 2 \frac{1}{2} 0 \pm \frac{1}{2} \left| \hat{x}_3 \right| 2 \frac{1}{2} 1 \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{eE}{\sqrt{3}} \left\langle 0 0 \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \left| \hat{3}_3 \right| 1 0 \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle \quad (5.2.36)$$

Mivel  $\hat{x}_3$  az  $\hat{S}_3$ -mal is felcserélhető, ezért ez egyenlő

$$\mp \frac{1}{\sqrt{3}} \langle 0 0 | \hat{x}_3 | 1 0 \rangle \quad (5.2.37)$$

Ezek pedig éppen a gömbfüggvények:

$$\mp \frac{eE}{\sqrt{3}} \langle 2 0 0 | \hat{x}_3 | 2 1 0 \rangle \quad (5.2.38)$$

E két állapot között kell kiszámolni az operátor mátrixelemeit.

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (5.2.39)$$

$$x_3 = r \cos \theta \quad (5.2.40)$$

$$W_{l'=0, l=1} = \mp \frac{eE}{\sqrt{3}} \int d^3x R_{20}^*(r) Y_0^{0*}(\theta, \varphi) x_3 R_{21}^*(r) Y_1^0(\theta, \varphi) \quad (5.2.41)$$

Erre az integrálra hajtunk, nevezzük el  $I$ -nek. Ezzel a jelöléssel:

$$W_{l'=0, l=1} = \mp \frac{eE}{\sqrt{3}} I \quad (5.2.42)$$

Ez negy  $4 \times 4$ -es mátrix.

$$W = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{eEI}{\sqrt{3}} \quad (5.2.43)$$

Egyszerű szerkezetű mátrix, de nem diagonális. Mik lesznek a sajátértékek? Természetesen  $\frac{eEI}{\sqrt{3}}$  és a sajátvektorai:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right\} \quad (5.2.44)$$

A jó állapotok:

$$\Psi_A = \frac{eEI}{\sqrt{3}} (|200\rangle + |210\rangle) \quad (5.2.45)$$

$$\Psi_B = \frac{eEI}{\sqrt{3}} (|200\rangle - |210\rangle) \quad (5.2.46)$$

Az energia eltolódása:

$$\Delta E = \pm \frac{eEI}{\sqrt{3}} \quad (5.2.47)$$

Határozzuk meg  $I$ -t! Ehhez kellene fog néhány gömbfüggvény:

$$Y_0^0 = \text{const} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad (5.2.48)$$

$$R(r) = R(\rho) \sim \rho^l e^{-\rho} F_{nl}(\rho) \quad (5.2.49)$$

$$\rho = \frac{r}{na} \quad (5.2.50)$$

Helyes normálással:

$$\Psi_{20}^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (2a)^{-3/2} \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-\frac{r}{2a}} \quad (5.2.51)$$

$$\Psi_{21}^0 = \frac{\cos \theta}{4\pi} (2a)^{-3/2} \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{2a}} \quad (5.2.52)$$

$$I = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty dr r^2 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \frac{1}{4\pi} (2a)^{-3} r \cos^2 \theta \frac{r}{a} \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-\frac{r}{a}} = -3a \quad (5.2.53)$$

$$\Delta E = \pm \frac{eEI}{\sqrt{3}} = \mp \sqrt{3} eEa \quad (5.2.54)$$

A másik eset, amikor az elektromos tér erős. Ekkor az energia csak a főkvantumszám-tól függ, ez sokkal egyszerűbb. Használhatjuk a másik bázist:

$$\langle nl'm'_s | \hat{x}_3 | nlm_l m_s \rangle \quad (5.2.55)$$

Mivel  $\hat{x}_3$  felcserélhető  $\hat{L}_3$ -mal és a spin harmadik komponensével is, ezért  $m_l = m'_l$  és  $m_s = m'_s$ .

Most is csak az  $n = 2$  eset érdekes, mégpedig, amikor az  $l = 0$  vagy  $l = 1$  lehet.

$$\langle n = 2l = 0m_l = 0 | \hat{x}_3 | n = 2l = 1m_l = 0 \rangle = I \quad (5.2.56)$$

Ezt az  $I$ -t pedig már kiszámoltuk. Most nincsenek Clebsh-Gordon együtthatók.

$$\Delta E = \pm 3aeE \quad (5.2.57)$$

A jó állapotok most is ugyanazok:

$$\Psi_A = \frac{eEI}{\sqrt{3}} (|200\rangle + |210\rangle) \quad (5.2.58)$$

$$\Psi_B = \frac{eEI}{\sqrt{3}} (|200\rangle - |210\rangle) \quad (5.2.59)$$

### 5.3. Variációs módszer

Konceptcionálisan az alapállapot energiájának becslésére, meghatározására alkalmas. Alapja egy állítás, miszerint:

$$E_1 \leq \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{|\Psi|^2} \quad (5.3.1)$$

Vagy, ami ezzel ekvivalens, ha  $\Psi$  egyre normált, akkor

$$E_1 \leq \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \quad (5.3.2)$$

Ahol  $E_1$  a legalacsonyabb energiasajátérték és  $\Psi \in \mathcal{H}$ . Ennek a bizonyításához legyen  $\hat{H}|\Phi_n\rangle = E_n|\Phi_n\rangle$ , úgy, hogy  $\langle \Phi_n | \Phi_m \rangle = \delta_{nm}$ . Vagyis tetszőleges  $\Psi$  kifejthető  $|\Phi_n\rangle$ -ek terén.

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |\Phi_n\rangle \quad (5.3.3)$$

Ha  $\Psi$  egyre normált:

$$1 = \langle \Psi | \Psi \rangle = \left\langle \sum_n c_n \Phi_n \left| \sum_m c_m \Phi_m \right. \right\rangle = \sum_{n,m} c_m^* c_n \langle \Phi_m | \Phi_n \rangle = \sum_{n,m} c_m^* c_n \delta_{mn} = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 \quad (5.3.4)$$

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \left\langle \sum_n c_n \Phi_n \left| \hat{H} \right| \sum_m c_m \Phi_m \right\rangle = \sum_{n,m} c_m^* c_n \langle \Phi_m | \hat{H} | \Phi_n \rangle = \sum_{n,m} c_m^* c_n E_n \delta_{mn} = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n \quad (5.3.5)$$

Definíció szerint  $E_1$  a legkisebb ezek közül, tehát ha az összes  $E_n$ -e kicserélem  $E_1$ -re, akkor lecsökkentetem:

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \geq \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2}_1 E_1 = E_1 \quad (5.3.6)$$

Ami pedig pont az állítás.

Hogyan lesz ebből közelítő módszer? Ha ez mellé még mellé tesszük, hogy  $E_1 = \langle \Phi_1 | \hat{H} | \Phi_1 \rangle$ , akkor  $E_1 = \min_{\Psi \in \mathcal{H}} \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$ . Ezt pont nem tudjuk megcsinálni, ezért nem azt csináljuk, hogy a teljes Hilbert téren végigmegyünk, hanem csak "elég sok" függvényen. Vesszünk tehát egy paraméterezett  $\Psi$ -t  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_n$  paraméterekkel és a paramétereket szerint minimalizálunk.

Elvileg, ha már tudjuk  $|\Phi_1\rangle$ -t, akkor  $E_2$ -re is használható.

$$E_2 \leq \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \quad (5.3.7)$$

Miközben  $|\Psi|^2 = 1$  és  $\langle \Psi | \Phi \rangle = 0$

#### 5.3.1. Harmonikus Oszcillátor

Tudjuk jól, hogy  $\Psi(x)$  alapállapotban valami lokalizált, szimmetrikus hullámfüggvény. Próbálkozzunk egy Gauss-sal, legyen a próbafüggvényünk  $\Psi(x) = Ae^{-bx^2}$ .

Első lépés: normálni kell:

$$|\Psi|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |A|^2 e^{-2bx^2} = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2b}} = 1 \rightarrow A = \left(\frac{\pi}{2b}\right)^{1/4} \quad (5.3.8)$$

Ez után jön a mátrixelem kiszámítása. A Hamilton operátort szét lehet szedni két részre, vagy egy kinetikus rész és van egy potenciál.

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (5.3.9)$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (5.3.10)$$

$$\langle \Psi | \hat{K} | \Psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} |A|^2 \int dx e^{-bx^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-bx^2} = -\frac{\hbar^2}{2m} |A|^2 \int dx e^{-bx^2} \left( -2be^{-bx^2} + 4b^2 x^2 e^{-bx^2} \right) \quad (5.3.11)$$

Használjuk ki, hogy:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2bx^2} dx = \frac{1}{4b|A|^2} \quad (5.3.12)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} dx = \frac{1}{|A|^2} \quad (5.3.13)$$

Ezzel:

$$\langle \Psi | \hat{K} | \Psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} |A|^2 \left( -\frac{2b}{|A|^2} + \frac{b}{|A|^2} \right) = \frac{\hbar^2}{2m} b \quad (5.3.14)$$

A potenciális tag elég egyszerű:

$$\langle \Psi | \hat{V} | \Psi \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2bx^2} dx = \frac{m \omega^2}{8b} \quad (5.3.15)$$

A kettőt összevetve:

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} b + \frac{m \omega^2}{8b} \quad (5.3.16)$$

Ezt kell minimalizálni a paraméterek szerint, hát most éppen egy van, a  $b$ .

$$\frac{\partial}{\partial b} \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m \omega^2}{8b^2} = 0 \rightarrow b^2 = \frac{m^2 \omega^2}{4\hbar^2} \quad (5.3.17)$$

Innen:

$$E_1 = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (5.3.18)$$

Ez pont a helyes alapállapot energiája, ami persze nem véletlen, hiszen éppen a jó hullámfüggvény-családban kerestünk.

### 5.3.2. Hélium atom alapállapota

Van 2 darab protonunk, 2 darab neutronunk és van 2 darab elektronunk. Elhanyagoljuk, hogy az atommag mozog, a finomfelhasadást, így a spinek nem játszanak semmilyen szerepet. Mivel kétféle  $\hat{S}_3$  komponens lehet, ezért nem kell az elektronokat azonos részecskeként kezelni.

Van tehát egy darab vonzócentrumunk  $2e$  töltéssel és van két részecskénk, melyek egymással is kölcsönhatnak.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_1 + \Delta_2) - e^2 \left( \frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) \quad (5.3.19)$$

Milyen  $\Psi$ -t használjunk? Ha nem lenne kölcsönhatás a két elektron között, akkor ez a probléma egzaktul megoldható lenne:

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Psi_{10}^0(\mathbf{r}_1) \Psi_{10}^0(\mathbf{r}_2) \quad (5.3.20)$$

ahol

$$\Psi_{10}^0(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{z^3}{\pi a^3}} e^{-\frac{zr}{a}} \quad E_n^z = \frac{e^2 z^2}{2n^3 a} \quad E_1^z = \frac{e^2 z^2}{2a} = 4E_1^{(H)} \quad (5.3.21)$$

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{z^3}{\pi a^3} e^{z\frac{r_1+r_2}{a}} \rightarrow \frac{8}{\pi a^3} e^{-2\frac{r_1+r_2}{a}} \quad (5.3.22)$$

Induljunk ki ebből a hullámfüggvényből, mint próbafüggvény:

$$\hat{H} |\Psi_0\rangle = 8E_1 |\Psi_0\rangle + \hat{V}_{ee} |\Psi_0\rangle \quad (5.3.23)$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{H} | \Psi_0 \rangle = 8E_1 + \langle \Psi_0 | \hat{V}_{ee} | \Psi_0 \rangle \quad (5.3.24)$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{V}_{ee} | \Psi_0 \rangle = e^2 \left( \frac{8}{\pi a^3} \right)^2 \int d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{e^{-4r_1/a}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (5.3.25)$$

Az integrálásokat egymás után végezzük el:

$$= e^2 \left( \frac{8}{\pi a^3} \right)^2 \int d^3 r_1 e^{-4r_1/a} \int d^3 r_2 \frac{e^{-4r_2/a}}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta}} = \quad (5.3.26)$$

$$= e^3 \left( \frac{8}{\pi a^3} \right)^2 \int d^3 r_1 I_2 \quad (5.3.27)$$

$$I_2 = \int_0^\infty r_2^2 dr_2 \int_0^\pi d\varphi_2 \int_0^\pi \sin \theta d\theta_2 \frac{e^{-4r_1/a}}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta}} = \quad (5.3.28)$$

$$2\pi \int_0^\infty r_2^2 e^{-4r_1/a} dr_2 \left[ \frac{1}{r_1 r_2} \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta} \right]_0^\pi = \quad (5.3.29)$$

$$2\pi \int_0^\infty r_2^2 e^{-4r_1/a} dr_2 \left[ \frac{1}{r_1 r_2} (r_1 + r_2 - |r_1 - r_2|) \right] = 2\pi \int_0^\infty r_2^2 e^{-4r_1/a} dr_2 \begin{cases} \frac{2}{r_1} & r_2 < r_1 \\ \frac{2}{r_2} & r_2 > r_1 \end{cases} \quad (5.3.30)$$

A maradék integrált szét lehet bontani két részre:

$$I_2 = 4\pi \int_0^{r_1} r_2^2 e^{-4r_1/a} \frac{1}{r_1} dr_2 + 4\pi \int_{r_1}^{\infty} r_2^2 e^{-4r_1/a} \frac{1}{r_2} dr_2 = \frac{\pi a^3}{8r_1} \left( 1 - \left[ 1 + \frac{2r_1}{a} \right] e^{-4r_1/a} \right) \quad (5.3.31)$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{V}_{ee} | \Psi_0 \rangle = e^2 \left( \frac{8}{\pi a^3} \right)^2 \int d^3 r_1 I_2 = -\frac{5}{2} E_1 \quad (5.3.32)$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{H} | \Psi_0 \rangle = \left( 8 - \frac{5}{2} \right) E_1 = \frac{11}{2} E_1 \quad (5.3.33)$$

Tudunk-e esetleg ennél is alacsonyabba menni? Az ötlet a következő: figyeljük az egész mozgást az egyik elektron szemszögéből, ő egy Coulomb potenciált észlel, csak a töltés most nem a mag töltésével, hanem valamilyen más töltéssel. Legyen most a variációs paraméterünk a töltés!

$$\Psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{z^3}{\pi a^3} e^{-z \frac{r_1+r_2}{a}} \quad (5.3.34)$$

Ez éppen sajátfüggvénye annak, mintha  $z$  töltéssel írnánk fel az atommagot.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_1 + \Delta_2) - e^2 \left( \frac{z}{r_1} + \frac{z}{r_2} \right) + e^2 \left( \frac{z-2}{r_1} + \frac{z-2}{r_2} + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) \quad (5.3.35)$$

$$\hat{H} \Psi_1 = 2z^2 E_1 \Psi_1 \quad (5.3.36)$$

$$\langle \Psi_1 | \hat{H} | \Psi_1 \rangle = 2z^2 E_1 + e^2 (z-2) \left\langle \Psi_1 \left| \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right| \Psi_1 \right\rangle + \langle \Psi_1 | \hat{V}_{ee} | \Psi_1 \rangle \quad (5.3.37)$$

Láttuk gyakorlaton, hogy

$$\left\langle \Psi_1 \left| \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right| \Psi_1 \right\rangle = -4z E_1 \quad (5.3.38)$$

A második tag pedig olyan, mint (5.3.25), csak át van skálázva:  $2/a \rightarrow z/a$ .

$$\langle \Psi_1 | \hat{V}_{ee} | \Psi_1 \rangle = \frac{5z}{8a} e^2 = -\frac{5z}{4} E_1 \quad (5.3.39)$$

$$\langle \Psi_1 | \hat{H} | \Psi_1 \rangle = 2z^2 E_1 - 4e^2 (z-2) z E_1 - \frac{5}{4} z E_1 \quad (5.3.40)$$

Ezt kell minimalizálni  $z$ -ben! A deriválás után azt kapjuk, hogy

$$z = \frac{27}{16} \approx 1,69 \quad (5.3.41)$$

A kísérleti tapasztalat ezzel 2%-os hiba mellett jó egyezést mutat.

### 5.3.3. Hidrogénmolekula ion

Két darab protonunk van és 1 darab elektronunk. A fő kérdés az, hogy van-e kötés vagy nincs. Tehát az alapállapot energiája az kevesebb-e, mintha az egyik protont elviszem nagyon messze.

Mivel a variációs módszer felső korlátot ad az alapállapot energiára, ezért ha találunk egy olyan hullámfüggvényt, amelyre az energia kisebb lesz, mint külön-külön, akkor mondhatjuk, hogy van kötés.

Fordítva ez persze nem igaz, ha csak nem próbáljuk végig az összes lehetséges hullámfüggvényre, nem mondhatjuk, hogy nincs kötés csak azért, mert néhány függvényre nincs.

Közelítéseket kell feltennünk, legyen  $R$  a két proton távolsága, ez legyen fix. Az elektron távolsága az első és második protontól  $r_1$  és  $r_2$ .

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - e^2 \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \quad (5.3.42)$$

Mivel, ha elvinnénk az egyik protont, akkor a sima hidrogénatom hullámfüggvényét kapnánk, ezért legyen a próbafüggvény szimmetrikus.

$$\Psi = A (\Psi_g(r_1) + \Psi_g(r_2)) \quad (5.3.43)$$

ahol  $\Psi_g = \Psi_{10}^0(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}$ .

A próbafüggvénynek természetesen normálnak kell lennie:

$$1 = |\Psi|^2 = |A|^2 \left\{ \underbrace{\int d^3r_1 |\Psi_g(r_1)|^2}_1 + \underbrace{\int d^3r_2 |\Psi_g(r_2)|^2}_1 + 2 \underbrace{\int d^3r \Psi_g(r_1) \Psi_g(r_2)}_I \right\} \quad (5.3.44)$$

$$1 = |A|^2(2 + 2I) \rightarrow |A|^2 = \frac{1}{2(1 + I)} \quad (5.3.45)$$

$$I = \frac{1}{\pi a^3} \int d^3r e^{-\frac{r_1+r_2}{a}} \quad (5.3.46)$$

Válasszunk egy trükkös koordináta-rendszert! Az egyik proton kerüljön az origóba, a másik proton pedig legyen a  $z$  tengely mentén, így:

$$r_2 = \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR \cos \theta} \quad (r = r_1) \quad (5.3.47)$$

Ezzel:

$$I = \frac{1}{\pi a^3} \int_0^\pi d\varphi \int dr r^2 e^{-\frac{r}{a}} \underbrace{\int d\theta \sin \theta e^{-\frac{\sqrt{r^2+R^2-2rR \cos \theta}}{a}}}_{I'} \quad (5.3.48)$$

Legyen  $y = \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR \cos \theta}$ , ekkor  $d(y^2) = 2y dy = 2rR \sin \theta d\theta$

$$I' = \int \sin \theta d\theta e^{-\frac{\sqrt{r^2+R^2-2rR \cos \theta}}{a}} = \frac{1}{rR} \int y dy e^{-\frac{y}{a}} \quad (5.3.49)$$

A határokat eddig elhanyagoltam, most azokat is kitaláljuk: ha  $\theta = 0$ , akkor  $y = |r - R|$ . Ha  $\theta = \pi$ , akkor  $y = r + R$ . Tehát:

$$I' = \frac{1}{rR} \int_{|r-R|}^{r+R} y dy e^{-\frac{y}{a}} = -\frac{a}{rR} \left[ e^{-\frac{r+R}{a}} (r + R + a) - e^{-\frac{|r-R|}{a}} (|r - R| + a) \right] \quad (5.3.50)$$

Ezt kell vissza írni  $I$ -be és ha elvégezzük az integrálást, akkor azt kapjuk, hogy

$$I = e^{-\frac{R}{a}} \left[ 1 + \frac{R}{a} + \frac{1}{3} \left( \frac{R}{a} \right)^2 \right] \quad (5.3.51)$$

Ez volt a nehezebbik lépés, a normálás. Most ki kell számolni a mátrixelemet:

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \quad (5.3.52)$$

Számítsuk ki először a Hamilton-operátor hatását a hullámfüggvényre:

$$\hat{H}\Psi = A \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - e^2 \frac{1}{r_1} - e^2 \frac{1}{r_2} \right] (\Psi_g(r_1) + \Psi_g(r_2)) \quad (5.3.53)$$

Ebben szerepelni fog két  $E_1$ , mivel hidrogén sajátállapotokat használunk, a maradékot le kell olvasni:

$$AE_1\Psi_g(r_1) + AE_1\Psi_g(r_2) - Ae^2 \left( \frac{1}{r_1} \Psi_g(r_2) + \frac{1}{r_2} E_1 \Psi_g(r_1) \right) \quad (5.3.54)$$

Az első két tag éppen az  $AE_1\Psi$ . Ezt kell még baloldaltól megszorozni  $\Psi$ -vel.

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = E_1 - |A|^2 e^2 \left[ \left\langle \Psi_g(r_1) + \Psi_g(r_2) \left| \frac{1}{r_1} \Psi_g(r_2) + \frac{1}{r_2} \Psi_g(r_1) \right. \right\rangle \right] = \quad (5.3.55)$$

$$= E_1 - \frac{e^2}{2a} \frac{1}{2(1+I)} 4 \left[ \underbrace{\left\langle a\Psi_g(r_1) \left| \frac{1}{r_2} \Psi_g(r_1) \right. \right\rangle}_{D_{\text{irekt}}} + \underbrace{\left\langle a\Psi_g(r_1) \left| \frac{1}{r_1} \Psi_g(r_2) \right. \right\rangle}_{x_{\text{change}}} \right] \quad (5.3.56)$$

A két elnevezéssel felírhatjuk, hogy:

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = E_1 \left( 1 + 2 \frac{D + X}{1 + I} \right) \quad (5.3.57)$$

Ha elvégezzük ezt a két integrálást, akkor azt kapjuk, hogy

$$D = \frac{a}{R} - \left( 1 + \frac{a}{R} \right) e^{-2\frac{R}{a}} \quad (5.3.58)$$

$$X = \left( 1 + \frac{R}{a} \right) e^{-\frac{R}{a}} \quad (5.3.59)$$

Ezzel kapunk egy felső becslést az elektron energiájára:

$$E_{\text{elektron}} \leq E_1 \left( 1 + 2 \frac{D + X}{1 + I} \right) \quad (5.3.60)$$



De van még nekünk proton-proton kölcsönhatásunk is:

$$V_{pp} = \frac{e^2}{R} = \frac{e^2}{2a} \frac{2a}{R} = -E_1 \frac{2a}{R} \quad (5.3.61)$$

Most legyen  $x = \frac{R}{a}$  és mi  $\Delta E$ -t szeretnénk kifejezni, ami nem mást, mint a molekula energiája, mínusz a hidrogénatom alapállapotú energiája:

$$\Delta E \leq E_{H_2^+} - E_1 = 2E_1 \frac{D+X}{1+I} - E_1 \frac{2a}{R} \quad (5.3.62)$$

Most mindenkit visszahelyettesítünk az új változónk segítségével:

$$\Delta E \leq -E_1 \left\{ \frac{2 \left(1 - \frac{2}{3}x^2\right) e^{-x} + (1+x)e^{-2x}}{x \left(1 + \left(1+x + \frac{1}{3}x^2\right)e^{-x}\right)} \right\} \quad (5.3.63)$$

Ha felrajzoltatjuk ezt a függvényt egy programmal, akkor látni fogjuk, hogy  $X = 2, 4$  esetén az energia negatív lesz, van tehát kötés. A protonok átlagos távolságára pedig azt kapjuk, hogy nagyjából 1,2 angström.

Ez persze nem a teljes leírás az igazihhoz három-test problémákat kell megoldani, ahol már a protonokat is kvantumosnak tételezzük fel.

## 5.4. Wentzel-Kramers-Brillouin közelítés

Ezt, a röviden WKB közelítésnek nevezett módszert egy dimenziós problémák kezelésére fejlesztették ki. Az ötlet az, hogy tudjuk, ha a potenciál konstans és az energia nagyobb a potenciálnál, akkor a Schrödinger-egyenlet megoldása egyszerű:

$$\Psi \sim Ae^{\pm ikx} \quad (5.4.1)$$

ahol ugye  $k = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$  és a hullámhossza a részecskének  $\frac{1}{k}$ -val megy. Ha  $V$  nem konstans, de lassan változik a hullámhosszhoz képest, akkor marad a síkhullám megoldás csak a hullámszám és az amplitúdó lassan változik, tehát  $Ae^{\pm ikx} \rightarrow A(x)e^{\pm i \int k(x) dx}$ .

Mi történik, ha az energia kisebb, mint a potenciál? Akkor formálisan ugyanaz a képlet, csak  $k$ -t ki kell cserélni  $\kappa$ -ra.

A módszer lényege, hogy megoldjuk a feladatot  $E > V$ -re, aztán  $E < V$ -re, majd összeillesztjük a fordulópontokban linearizált potenciállal.

Mit mondhatunk azokon a helyeken, ahol jó a közelítés?

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi \quad p(x) = \sqrt{2m(E-V(x))} \quad \text{klasszikus impulzus} \quad (5.4.2)$$

Ha  $E > V$ , akkor  $p(x)$  valós.

Keressük a megoldást nagyság és fázis szerinti felbontásban.

$$\Psi(x) = A(x)e^{i\Phi(x)}, \quad A(x), \Phi(x) \in \mathbb{R} \quad (5.4.3)$$

$$\frac{d\Psi}{dx} = A'e^{i\Phi} + iA\Phi'e^{i\Phi} \quad (5.4.4)$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = [(A'' + 2iA'\Phi') + iA\Phi'' - A\Phi'^2] e^{i\Phi} \quad (5.4.5)$$

Ezt beírva:

$$A'' + 2iA'\Phi' + iA\Phi'' - A\Phi'^2 = -\frac{p^2}{\hbar^2}A \quad (5.4.6)$$

Komplex egyenlet, de  $A$ ,  $\Phi$  valós, így két egyenletünk van:

$$\begin{aligned} \text{valós} \quad A'' &= A \left( \Phi'^2 - \frac{p^2}{\hbar^2} \right) \\ \text{képzetes} \quad 2A'\Phi' + A\Phi'' &= 0 \rightarrow (A^2\Phi')' = 0 \end{aligned} \quad (5.4.7)$$

A képzetes részt egyszerűen meg tudjuk oldani:

$$A^2\Phi' = \text{const} \rightarrow A = \frac{c'}{\sqrt{\Phi}} \quad (5.4.8)$$

Az első egyenlet általánosan nem megoldható. Most jön be a közelítés: lassan változik a potenciál, így  $A$  is, tehát  $A''$  már elhanyagolható.

$$\frac{A''}{A} \ll (\Phi')^2 \quad (5.4.9)$$

$$\Phi'^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} \quad (5.4.10)$$

Ezt meg tudjuk oldani:

$$\Phi(x) = \pm \int \frac{1}{\hbar} p(x) dx \quad (5.4.11)$$

$$A(x) = \frac{c'}{\sqrt{\Phi'}} = \frac{c}{\sqrt{p(x)}} \quad c \text{ már tartalmazza } \hbar\text{-t!} \quad (5.4.12)$$

A megoldás tehát ebben a közelítésben:

$$\Psi(x) = \frac{c}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx'} \quad (5.4.13)$$

Az integrálási határoknál nem számít, hogy honnan integrálunk, met konstansba vihető.

Egy érdekesség:

$$|\Psi|^2 = \frac{c^2}{p(x)} \sim \frac{1}{v} \quad (5.4.14)$$

Tehát a megtalálási valószínűsége a részecskének a sebesség gyökével megy, tehát ahol kicsi a sebessége a részecskének, ott gyakran tartózkodik, ahol gyors a részecske, ott pedig ritkán.

Általánosan kiírva:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left( c_+ e^{+\frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx'} + c_- e^{-\frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx'} \right) = \quad (5.4.15)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{p(x)}} (c_1 \sin \Phi(x) + c_2 \cos \Phi(x)) \quad (5.4.16)$$

Nézzünk egy olyan példát, ahol a potenciál egy végtelen mély gödör, de a gödör alja "göröngyös":

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

Határfeltétel:  $\Psi(0) = \Psi(a) = 0$ . Úgy választjuk meg a konstanst, hogy  $\Phi(x=0)$ , azaz  $c_2 = 0$ .

$$\Psi(a) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} c_1 \sin \Phi(a) = 0 \rightarrow \sin \Phi(a) = 0 \quad (5.4.17)$$

azaz

$$\Phi(a) = n\pi \quad n > 0 \quad (5.4.18)$$

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^a p(x) dx = n\pi = \frac{1}{\hbar} \int_0^a \sqrt{2m(E - V(x))} dx = n\pi \quad (5.4.19)$$

### 5.4.1. Alagút effektus

Most vizsgáljuk meg az alagút effektust, azaz azt a tartományt, ahol már az energia az kisebb, mint a potenciál!

Mit kell ilyenkor csinálni? Formálisan ugyanúgy megy minden, csak  $p(x)$  képzetes. A számolás menete ettől eltekintve megegyezik a valós esettel, a végeredmény:

$$\Psi(x) \sim \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'} \quad (5.4.20)$$

Megoldjuk az egyenletet a három különböző tartományon,  $A$  a bejövő hullám amplitúdója,  $B$  a visszaverődött és  $F$  az áthaladt hullám amplitúdója. Amit keresünk az  $|F|^2/|A|^2$  együttható.

$$\begin{aligned} \text{I.} \quad & \Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \text{II.} \quad & \Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left( Ce^{+\frac{1}{\hbar} \int^x p(x') dx'} + De^{-\frac{1}{\hbar} \int^x p(x') dx'} \right) \\ \text{III.} \quad & \Psi(x) = Fe^{ikx} \end{aligned} \quad (5.4.21)$$

Ha a határfeltételeket illesztjük, akkor azt lehet megmutatni, hogy, ha  $L$  nagy és a potenciál az magas, tehát sokkal nagyobb, mint a részecske energiája, akkor  $C \ll D$ , exponenciálisan lecsengő megoldást kapunk.

Ebből az következik, hogy

$$\frac{|F|}{|A|} = e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'} \quad (5.4.22)$$

Legyen  $t = \frac{|F|^2}{|A|^2} = e^{-2\gamma}$ , ahol  $\gamma = \int_0^x |p(x')| dx'$ .

### 5.4.2. Alfa-bomlás

Ennek egyik alkalmazása az alfa bomlás egy nagyon egyszerű modellje, amely Gamovtól származik.

Ez azt jelenti, hogy van egy atommagunk, amelynek van  $z+2$  töltése és ez szétesik egy  $z$  töltésű és egy  $2$  töltésű alfa részecskére. Amikor a részecske még bent van a magban,

akkor a magerők, amelyek összetartják a magot dominálnak, azonban, ha távol van a részecske, akkor már a Coulomb dominál. Tehát a potenciált lehet úgy jellemezni a távolság függvényében, hogy közel az origóhoz van egy erősen mély potenciálgödör, egy bizonyos távolsággal később pedig a Coulomb lecsengés.

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m} \sqrt{\frac{2ze^2}{r} - E} dr = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \left[ r_2 \arccos \sqrt{\frac{r_1}{r_2}} - \sqrt{r_1(r_2 - r_1)} \right] \quad (5.4.23)$$

Tipikus esetekben az energia sokkal kisebb, mint a potenciál csúcsa, tehát sorba lehet fejteni, mivel  $r_2 \gg r_1$ . Tehát  $\arccos \sqrt{\frac{r_1}{r_2}} \approx \frac{\pi}{2} - \sqrt{\frac{r_1}{r_2}}$ . Ezzel:

$$\gamma \approx \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \left[ r_2 \frac{\pi}{2} - 2\sqrt{r_1 r_2} \right] = \kappa_1 \frac{z}{\sqrt{E}} - \kappa_2 \sqrt{z r_1} \quad (5.4.24)$$

Tehát  $\gamma$  az energia négyzetgyökének reciprokanak lineáris függvénye.

### 5.4.3. Illesztés a fordulási pontoknál

Már itt is látszik, hogy el volt sumákolva az a rész, ahol a potenciál nem változott olyan gyorsan. Hogy kell összeilleszteni az eredményeinket a fordulási pontokban? Az eddigi eredmények a klasszikus eset, mikor a potenciál kisebb, mint az energia, a nem túl klasszikus, mikor az energia kisebb, mint a potenciál. Mi történik a kettő között?

Azt a trükköt fogjuk alkalmazni, hogy az eredeti megoldásunkba még egy fázist be-csempészünk:

$$\Psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p(x)}} B \sin \left( \frac{1}{\hbar} \int_x^0 p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) + C \cos \left( \frac{1}{\hbar} \int_x^0 p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) & \text{ha } x < 0 \\ \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} D e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'} & \text{ha } x > 0 \end{cases}$$

A normáltság miatt tűnt a +-os tag az exponenciálisból.

Hogyan kell összekötni? Megoldjuk a Schrödinger-egyenletet úgy, hogy a potenciált linearizáljuk:  $V(x) = E + V'(0)x$ . Az egész közelítés pontossága azon múik, hogy azon a tartományon, ahol nem érvényes a WKB közelítés mennyire lineáris a potenciál.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + [E + V'(0)x] \Psi = E \Psi \quad (5.4.25)$$

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} = \text{const} \cdot x \cdot \Psi \quad \text{const} = \alpha^3 = \frac{2mV'}{\hbar^2} \quad (5.4.26)$$

Legyen  $z := \alpha \cdot x$ ! Ezzel  $\frac{d^2}{dx^2} = \alpha^2 \frac{d^2}{dz^2}$ . Ezzel az egyenletünk a következő alakot öltött:

$$\frac{d^2 \Psi}{dz^2} = z \Psi \quad (5.4.27)$$

Ez egy ismert differenciálegyenlet: Airy-egyenlet, melynek megoldásai az Airy-függvények lineárkombinációja.

Explicit alakjuk integrál reprezentációban:

$$A_i(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos\left(\frac{s^3}{3} + sz\right) ds \quad B_i(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \left[ e^{-\frac{s^3}{3} + sz} + \sin\left(\frac{s^3}{3} + sz\right) \right] ds \quad (5.4.28)$$

Számunkra az aszimptotikus viselkedésük a lényeges:

$$A_i(z) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}z^{3/2}} \quad z \rightarrow \infty \quad (5.4.29)$$

$$B_i(z) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} e^{\frac{2}{3}z^{3/2}} \quad z \rightarrow \infty \quad (5.4.30)$$

$$A_i(z) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \quad z \rightarrow -\infty \quad (5.4.31)$$

$$B_i(z) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \quad z \rightarrow -\infty \quad (5.4.32)$$

Tehát, ha feltesszük, hogy a fordulópont előtt már érvényes a WKB de még lineáris a potenciál, akkor:

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} = \sqrt{2m(E - E + X'(x))} = \sqrt{2mV'}\sqrt{-x} \quad \text{képzetes} \quad (5.4.33)$$

$$|p(x)| = \sqrt{2mV'}\sqrt{x} = \hbar\alpha^{3/2}\sqrt{x} \quad (5.4.34)$$

Ezen a tartományon még érvényes a WKB:

$$\Psi_{\text{WKB}} = \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'} \quad (5.4.35)$$

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx' = \int_0^x \alpha^{3/2} \hbar \sqrt{x'} dx' = \hbar \frac{2}{3} (\alpha x)^{3/2} \quad (5.4.36)$$

$$\Psi_{\text{WKB}} = \frac{D}{\sqrt{\hbar\alpha^{3/4}x^{1/4}}} e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} = \frac{D}{\sqrt{\hbar\alpha^{1/2}z^{1/4}}} e^{-\frac{2}{3}(z)^{3/2}} \quad (5.4.37)$$

A kétféleképpen megkapott hullámfüggvénynek meg kell egyeznie, tehát:

$$\Psi(x) = aA_i(z) + bB_i(z) = \Psi_{\text{WKB}} \rightarrow b = 0 \quad (5.4.38)$$

Az együtthatókat összehasonlítva:

$$\frac{a}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} = \frac{D}{\sqrt{\hbar}z^{3/2}} \quad (5.4.39)$$

Azaz:

$$a = 2\sqrt{\frac{\pi}{\hbar\alpha}} D \quad (5.4.40)$$

Ugyanezt kell végigjátszani a másik tartományon a másik illesztési pontnál, figyelve arra, hogy  $p$  valós. Ebből a számolásból azt kapjuk, hogy

$$a = \sqrt{\frac{\pi}{\hbar\alpha}} B \quad (5.4.41)$$

Ebből azonnal látszik, hogy a két együttható egymásnak kétszerese. Tehát az eredményünk, ha a fordulópont  $x_2$ -ben van:

$$\Psi(x) = \begin{cases} \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[ \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] & \text{ha } x < x_2 \\ \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p(x')| dx' + \frac{\pi}{4}} & \text{ha } x_2 > x \end{cases} \quad (5.4.42)$$

Ugyanígy összerakható az is, ha bal oldalon van a klasszikus esetet:

$$\Psi(x) = \begin{cases} \frac{D'}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} |p(x')| dx' + \frac{\pi}{4}} & \text{ha } x < x_1 \\ \frac{2D'}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[ \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] & \text{ha } x > x_1 \end{cases} \quad (5.4.43)$$

## 5.5. Időfüggő perturbációszámítás

Eddig az volt, hogy a potenciál és ezáltal a teljes Hamilton-operátor időfüggetlen volt. Ilyen esetekkel már sokat foglalkoztunk, az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet alakítottuk.

Most az időfüggő egyenletet kell nézegetni:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle \quad (5.5.1)$$

Ha  $\hat{H}$  időfüggetlen, akkor az időfüggés leválasztható:  $\Psi(t) = \Psi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$ . Ezzel az általános megoldás:

$$\Psi(t) = \sum_n c_n \Psi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (5.5.2)$$

Ha energia sajátállapotban van (azaz egy  $c$  azonosan 1, az összes többi nulla), akkor abban az állapotban is marad. Zárt rendszerre ez mindig igaz. De akkor hogy van az, hogy a hidrogén atom mégis sugároz, miután egy gerjesztett állapotból leugrik az alapállapotba? Természetesen zárt rendszer, mint olyan, nem létezik, a környezetével mindig kölcsönhat.

Általában teljesül, hogy a kölcsönhatás függ az időtől, de kicsi:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t) \quad (5.5.3)$$

Mit lehet egzaktul csinálni? Egyelőre nem teszünk fel semmit, erről a  $\hat{H}'$ -ről. Most  $\hat{H}_0$ -nak sajátállapotai a  $\Psi_n$ -ek. Az időfejlődés kifejthető  $\Psi_n$  szerint.

$$\Psi(t) = \sum_n c_n(t) \Psi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (5.5.4)$$

Szeretnénk a  $c_n$  együtthatókat meghatározni. Ehhez kezdeti feltételek kellene. Fejtsük ki  $\hat{H}'$  hatásait  $\Psi_n$ -re is ugyanezen a bázison:

$$\hat{H}' \Psi_n = \sum_m d_m \Psi_m \quad d_m = \langle \Psi_m | \hat{H}'(t) | \Psi_n \rangle \quad (5.5.5)$$

Ez egy mátrixelem, egyszerűség kedvéért ezt most másképpen fogjuk jelölni  $d_m = H'_{nm}(t)$ , ezzel:

$$\hat{H}'(t) = \sum_m H'_{nm} \Psi_m \quad (5.5.6)$$

Ezt az egészet most betesszük az egyenletbe:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \sum_m \left[ \frac{dc_n}{dt} \Psi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} - \frac{i}{\hbar} E_n t c_n(t) \Psi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \right] i\hbar \quad (5.5.7)$$

A másik oldal:

$$\hat{H}\Psi = \hat{H}_0\Psi + \hat{H}'(t)\Psi = \sum_n c_n(t) E_n \Psi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} + \sum_n c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \sum_m H'_{nm} \Psi_m \quad (5.5.8)$$

A második tagban ki kell cserélni az indexeket, hogy a két egyenletet egybeejtessük!

$$i\hbar \sum_m \frac{dc_n}{dt} \Psi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} = \sum_n \left( \sum_m H'_{nm} c_m e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) t} \right) \Psi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (5.5.9)$$

Ez pont egy differenciálegyenlet  $c$ -re:

$$i\hbar \frac{dc_n}{dt} = \sum_n H'_{nm} c_m e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) t} \quad (5.5.10)$$

Vezessünk be megint egy új jelölést: legyen  $E_m - E_n = \hbar\omega_{nm}$ , ezzel:

$$i\hbar \frac{dc_n}{dt} = \sum_m H'_{nm}(t) c_m(t) e^{i\omega_{nm} t} \quad (5.5.11)$$

Eddig minden egzakt volt, csak egy kifejtést tettünk be  $\Psi$ -k helyére. Az egyenletet semmivel sem egyszerűbb megoldani, mint a Schrödinger-egyenletet. Iteratív módszerrel próbálkozunk, mivel a megoldás  $H'$  szerese az eredetinek. Tehát a nulladik közelítés az, hogy az összes  $c$  konstans.

Az első közelítés az, hogy ezt a konstanst beteszem a jobb oldalra és akkor megoldjuk egy integrálással  $c$ -t első közelítésben. Ez a  $H'$ -vel arányos lesz.

A második közelítés, hogy ezt az eredményt megint beírjuk jobbra és újra kiintegráljuk. Ez már annyira nem triviális, nekünk bőven elég lesz az első rend.

Az első rendben  $c$  konstans, mégpedig legyen ez a  $c_m(t=0)$ . Egy sima integrált kell elvégezni:

$$c_N(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_m c_m(0) \int_0^t dt' H'_{nm}(t') e^{i\omega_{nm} t'} + c_n(t=0) \quad (5.5.12)$$

### 5.5.1. Monokróm hatás

Gyorsan nézzünk erre egy konkrét példát! Legyen a  $\hat{H}' = \hat{U} e^{-i\omega t}$ . Ez így nem hermitikus! Ehhez még hozzá kell adni az adjungáltját  $\hat{H} = \hat{U} \hat{U} e^{-i\omega t} + \hat{U}^+ \hat{U} e^{i\omega t}$ . Ezt tegyük be!

$$\int_0^t dt' H'_{nm}(t') e^{i\omega_{nm} t'} = \int_0^t dt' \left[ U_{nm} e^{i(\omega_{nm} - \omega) t'} + U_{nm}^+ e^{i(\omega_{nm} + \omega) t'} \right] = \quad (5.5.13)$$

$$= -\frac{i}{\omega_{nm} - \omega} U_{nm} \left( e^{i(\omega_{nm} - \omega)t} - 1 \right) - \frac{i}{\omega_{nm} + \omega} U_{nm}^* \left( e^{i(\omega_{nm} + \omega)t} - 1 \right) \quad (5.5.14)$$

$$c_n(t) = c_m(0) - \frac{1}{\hbar} \sum_m c_m(0) \left[ U_{nm} \frac{e^{i(\omega_{nm} - \omega)t} - 1}{\omega_{nm} - \omega} + U_{nm}^* \frac{e^{i(\omega_{nm} + \omega)t} - 1}{\omega_{nm} + \omega} \right] \quad (5.5.15)$$

Legyen kezdetben csak  $n = 1$  állapot, tehát  $c_1(0) = 1$ , minden más nulla. És keressük  $c_n(t)$ , ahol  $n$  már nem egy.

$$c_n(t) = -\frac{1}{\hbar} c_1(0) \left[ U_{n1} \frac{e^{i(\omega_{n1} - \omega)t} - 1}{\omega_{n1} - \omega} + U_{n1}^* \frac{e^{i(\omega_{n1} + \omega)t} - 1}{\omega_{n1} + \omega} \right] \quad (5.5.16)$$

Ha  $t$  kicsi, akkor sorba lehet fejteni és mind a két tag egy  $it$  járulékot fog adni. Ha  $t$  nagy akkor már nem jogos a sorfejtés, oszcillálni fog, de nem megy el a végtelenbe, az amplitúdó nagysága  $\frac{1}{\omega_{n1} \pm \omega}$ -val megy.

De mit is jelent az, hogy  $t$  kicsi? Igazság szerint nem  $t$  szerint kell sorba fejteni, hanem az exponens szerint. Ebből következik, hogy ha  $\omega_{nm} \pm \omega$  kicsi, akkor  $t$  akár nagy is lehet. Azonban, ha  $\omega_{nm} \approx \omega$ , akkor a különbség kicsi, az összeg nem feltétlenül, tehát az első tag  $it$  járulékot hoz, a másik tag pedig oszcillál.

Ebből azt a következtetést tudjuk levonni, hogy ha a külső gerjesztés frekvenciája hasonló a rendszeréhez, akkor lesz elnyelés. Tehát ebben a közelítésben elegendő az első tagot figyelembe venni:

$$c_n(t) = -\frac{1}{\hbar} U_{n1} \frac{e^{i(\omega_{n1} - \omega)t} - 1}{\omega_{n1} - \omega} \quad (5.5.17)$$

Annak a valószínűsége, hogy  $t$  idő után az  $n$ -dik állapotban van a rendszer:

$$P(1 \rightarrow n) = |c_n|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |U_{n1}|^2 4 \frac{\sin^2 \frac{\omega_{n1} - \omega}{2} t}{(\omega_{n1} - \omega)^2} \quad (5.5.18)$$

Állítás:

$$\frac{2 \sin^2 \left( \frac{W}{2} t \right)}{\pi W^2 t} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \delta(W) \quad (5.5.19)$$

Ha  $W \neq 0$ , akkor

$$\frac{\sin^2 \left( \frac{W}{2} t \right)}{W^2 t} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0 \quad (5.5.20)$$

Legyen  $u = \frac{W}{2} t$ ,  $du = \frac{dW}{2} t$ . Illetve:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dW \frac{2 \sin^2 \left( \frac{W}{2} t \right)}{\pi W^2 t} = \int \frac{1 \sin^2 u}{\pi u^2} du = 1 \quad \text{minden } t\text{-re} \quad (5.5.21)$$

Ez előállítja a  $\delta$ -t.

$$P(1 \rightarrow n) = \frac{|U_{n1}|^2}{\hbar^2} 2t\pi \frac{2 \sin^2 \frac{\omega_{n1} - \omega}{2} t}{\pi (\omega_{n1} - \omega)^2} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{2\pi}{\hbar} t |U_{n1}|^2 \delta(\omega_{n1} - \omega) \quad (5.5.22)$$

Ez láthatóan arányos az idővel, ha ebből kifejezzük az "időegységre jutó valószínűséget" (jele  $\gamma$ ):

$$\gamma(1 \rightarrow n) = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{n1}|^2 \delta(E_n - E_1 - \hbar\omega) \quad (5.5.23)$$

Ez a Fermi-féle aranyszabály: ha sokáig várunk, akkor csak akkor lesz gerjesztés, ha a frekvencia éppen az energiák különbsége.



### 5.5.2. Hidrogén atom fényben

Legyen most a konvenciónk szerint a fénysebesség értéke 1.

Egy elektromágneses hullámunk lesz, ilyenkor  $|\mathbf{E}| = |\mathbf{B}|$ . A részecskére ható Lorentz-erő:  $Q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$ , ha a részecske sebessége sokkal kisebb, mint a fénysebesség akkor a mágneses térrel való kölcsönhatás elhanyagolható. Tehát csak az elektromos térrel kell foglalkozni.

Szerencsére lesz még egy egyszerűsítés: Az elektromos hullám, ha egy síkhullámról van szó, akkor:

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \sim e^{i(\mathbf{kx} - \omega t)} = \hat{U} e^{\pm i\omega t} \quad (5.5.24)$$

Láttuk, hogy akkor lesz kibocsátás, vagy elnyelés, ha  $\omega \sim \omega_{nm}$ . Ebből megbecsülhető, ha beírunk konkrét számokat, hogy a hullámhossz az közel 1000 angström. Ez azt jelenti hogy a hullámhossz 3 nagyságrenddel nagyobb, mint az atom mérete, tehát feltesszük, hogy az atomon belül az elektromos tér konstans (térben).

Vagyis:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E} e^{-i\omega t} + \mathbf{E} e^{i\omega t} = 2\mathbf{E} \cos \omega t \quad (5.5.25)$$

Korábban már csináltunk ilyet, ha homogén az elektromos tér, akkor  $\mathbf{E} = -\nabla\Phi$ , azaz  $\Phi = -\frac{1}{2}\mathbf{x}\mathbf{E}$ , ezzel:

$$\hat{H}' = -e\Phi = \frac{1}{2}e\mathbf{E}(t)\mathbf{x} = \frac{1}{2}e\mathbf{E}\mathbf{x} (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) = \mathbf{E} \cos \omega t \quad (5.5.26)$$

$$\hat{U} = \frac{1}{2}e\mathbf{E}\hat{\mathbf{x}} \quad (5.5.27)$$

Az egyszerűség kedvéért legyen  $\mathbf{E} \parallel \mathbf{e}_z$ , ezzel

$$\hat{U} = \frac{1}{2}eE\hat{x}_3 \quad (5.5.28)$$

Amit ki akarunk számítani az:

$$\gamma(1 \rightarrow n) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{2}eE |\langle 1|\hat{x}_3|n\rangle|^2 \delta(E_n - E_1 - \hbar\omega) \quad (5.5.29)$$

Vagy egy kicsit precízebben a következő mátrixelemekre lesz szükségünk:

$$\langle njlm|\hat{x}_3|n'j'l'm'\rangle \quad (5.5.30)$$

Ezeket már korábban meghatároztuk, a lényeges kérdés, hogy mely elemek lesznek nem nullák? Akkor van átmenet csak, ha a mátrixelem nem nulla. Ehhez azonban már nem szerencsés a  $z$  tengelyt lefixálni, mert semmi garancia nincsen rá, hogy az elektromos tér polarizációja olyan irányú, mint az impulzusmomentum  $z$  komponensének iránya. Azt kell kiszámolni, hogy

$$\gamma(1 \rightarrow n) = e \frac{\pi}{\hbar} \sum_i E_i |\langle njlm|\hat{x}_i|n'j'l'm'\rangle|^2 \delta(E_n - E_1 - \hbar\omega) \quad (5.5.31)$$

Itt most olyan erős elektromos tér van, ami egy teljes színtel képes eltolni az elektron energiáját, tehát a finom felhasadást azt nyugodtan el lehet hanyagolni. Ami azt jelenti,

hogy minden szerint degenerált lesz az energia, kivéve az  $n$  szerint. Ez alapján viszont használhatjuk  $n, l, m_l, s, m_s$  bázist. Azért jó ezt használni, mert az  $\hat{x}_i$  kommutál a spinel, tehát  $s$  és  $m_s$  nem változhat. Továbbiakban az  $m_l$  legyen csak  $m$  és arra vagyunk kíváncsiak, hogy

$$\langle nlm|\hat{x}_i|n'l'm'\rangle \quad (5.5.32)$$

mátrixelemek mikor lesznek nem nullák.

Elsőként vizsgáljuk meg azt az esetet, amikor  $i = 3$ . Azt tudjuk, hogy  $[\hat{L}_3, \hat{x}_3] = 0$ , azaz  $m$ -et nem tudja megváltoztatni:

$$\langle nlm|[\hat{L}_3, \hat{x}_3]|n'l'm'\rangle = \langle nlm|\hat{L}_3\hat{x}_3 - \hat{x}_3\hat{L}_3|n'l'm'\rangle = \hbar(m - m') \langle nlm|\hat{x}_3|n'l'm'\rangle \quad (5.5.33)$$

Mivel nullát írtunk be, így ez nyilván nulla, ha  $m \neq m'$ , akkor a mátrixelem nulla, tehát  $m$  meg kell egyeznie  $m'$ -vel.

A továbbiakhoz írjuk fel a következő kommutátorokat:

$$[\hat{L}_3, \hat{x}_1] = i\hbar\hat{x}_2 \quad (5.5.34)$$

$$[\hat{L}_3, \hat{x}_2] = -i\hbar\hat{x}_1 \quad (5.5.35)$$

Ezzel:

$$i\hbar \langle nlm|\hat{x}_2|n'l'm'\rangle = \langle nlm|\hat{L}_3\hat{x}_1 - \hat{x}_1\hat{L}_3|n'l'm'\rangle = \hbar(m - m')i\hbar \langle nlm|\hat{x}_1|n'l'm'\rangle \quad (5.5.36)$$

hasonlóan:

$$-i\hbar \langle nlm|\hat{x}_1|n'l'm'\rangle = \hbar(m - m') \langle nlm|\hat{x}_2|n'l'm'\rangle \quad (5.5.37)$$

A kettőt összerajzolva:

$$\langle nlm|\hat{x}_1|n'l'm'\rangle = i(m - m') \langle nlm|\hat{x}_2|n'l'm'\rangle = (m - m')^2 \langle nlm|\hat{x}_1|n'l'm'\rangle \quad (5.5.38)$$

Tehát  $(m - m')^2 = 1!$  Azaz  $m = m' \pm 1$ . Ezzel összességében:  $\Delta m = 0, -1, +1$ , más nem.

Mi lesz a  $\Delta l$ ? Korábban már láttuk azt, hogy a paritás miatt  $l \neq l'$ , sőt a különbségüknek páratlannak kell lennie.

Állítás:

$$[\hat{L}^2, [\hat{L}^2, \hat{x}_i]] = 2\hbar^2 (\hat{x}_i\hat{L}^2 + \hat{L}^2\hat{x}_i) \quad (5.5.39)$$

Ezt felhasználva, ha mind a kettőt megszendvicseljük, akkor a kettőnek meg kell egyeznie, amiből leolvashatunk majd egy relációt  $l$  és  $l'$  között. Jobb oldallal kezdjük, mert az egyszerű:

$$2\hbar^2 \langle nlm|(\hat{x}_i\hat{L}^2 + \hat{L}^2\hat{x}_i)|n'l'm'\rangle = 2\hbar^4 [l(l+1) + l'(l'+1)] \langle nlm|\hat{x}_i|n'l'm'\rangle \quad (5.5.40)$$

Bal oldal:

$$\langle nlm|\hat{L}^2 [\hat{L}^2, \hat{x}_i] - [\hat{L}^2, \hat{x}_i] \hat{L}^2|n'l'm'\rangle = \hbar^2 [l(l+1) - l'(l'+1)] \langle nlm|[\hat{L}^2, \hat{x}_i]|n'l'm'\rangle =$$

$$= \hbar^2 [l(l+1) - l'(l'+1)] \langle nlm | \hat{x}_i \hat{L}^2 - \hat{L}^2 \hat{x}_i | n'l'm' \rangle = \hbar^4 [l(l+1) - l'(l'+1)]^2 \langle nlm | \hat{x}_i | n'l'm' \rangle \quad (5.5.41)$$

A kettőt összenézve és szorzattá alakítva a faktorokat azt kapjuk, hogy

$$[(l+l'+1)^2 - 1] [(l-l')^2 - 1] = \quad (5.5.42)$$

$l \neq l'$  a paritár miatt, ezért az első tag nem lehet nulla. A második tag már lehet nulla, ha  $\Delta l = \pm 1$ .

Két kiválasztási szabály van: csak olyan szintek között lehet átmenet, vezető rendben, ahol  $\Delta l = \pm 1$  és  $\Delta m = 0, -1, +1$ !

### 5.5.3. Véletlenszerű perturbáció

Feltesszük, hogy a perturbáló Hamilton-operátor véletlenszerű függvénye  $t$ -nek, de a statisztikája már nem. Azaz, ha kiszámítjuk  $\hat{H}'$ -nek valamilyen mátrixelemét, akkor az csak  $t_2 - t_1$ -től függhet.

$$\overline{H'_{nm}(t_1)H'^*_{nm}(t_2)} = f_{nm}(t_2 - t_1) \quad (5.5.43)$$

Egy speciális esetet vizsgálunk:  $n = 1$ -ből indulunk és  $t$  idő elteltével milyen valószínűséggel mérünk  $c_n(t)$ -t? A kezdetben legyünk egy jól meghatározott állapotban,  $c_n(0) = \delta_{n1}$ .

$$c_n(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' H'_{n1}(t') e^{i\omega_{n1}t'} \quad (5.5.44)$$

$$P(1 \rightarrow n) = |c_n|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 H'_{n1}(t_1) H'^*_{n1}(t_2) e^{i\omega_{n1}(t_1-t_2)} \quad (5.5.45)$$

Most csináljuk meg az átlagolást és használjuk ki (5.5.44)-t!

$$\overline{|c_n|^2} = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 f_{n1} e^{i\omega_{n1}(t_1-t_2)} \quad (5.5.46)$$

Ez a legáltalánosabb alakja a problémának, kezelhetőség kedvéért érdemes ezt Fourier-sorban felírni. Vizsgáljuk általánosan,  $f_{nm}$ -mel:

$$f_{nm}(t_1 - t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega F_{nm}(\omega) e^{i\omega_{n1}(t_1-t_2)} \quad (5.5.47)$$

$$\overline{P(1 \rightarrow n)} = \overline{|c_n|^2} = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega F_{n1}(\omega) \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 f_{n1} e^{i(t_1-t_2)(\omega_{n1}-\omega)} \quad (5.5.48)$$

Az időintegrálokat vissza tudjuk alakítani:

$$\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 e^{i(t_1-t_2)(\omega_{n1}-\omega)} = \int_0^t dt_1 e^{-(\omega_{n1}-\omega)t_1} \int_0^t dt_2 e^{-i(\omega_{n1}-\omega)t_2} \quad (5.5.49)$$

Ezt visszaírva:

$$\overline{P(1 \rightarrow n)} = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega F_{n1}(\omega) \left| \int_0^t dt_1 e^{-(\omega_{n1}-\omega)t_1} \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega F_{n1}(\omega) \frac{\sin^2 \left[ \frac{\omega_{n1}-\omega}{2} t \right]}{(\omega_{n1}-\omega)^2} \quad (5.5.50)$$

Ha nagyon sokáig várunk, akkor a szinuszos tag ad egy  $\frac{\pi}{2}t\delta(\omega_{n1} - \omega)$  tagot. Ezzel a Dirac-deltával el lehet végezni az integrálást:

$$\overline{P(1 \rightarrow n)} = \frac{2\pi}{\hbar^2} t F(\omega_{n1}) \rightarrow \gamma(1 \rightarrow n) = \frac{2\pi}{\hbar^2} = (\omega_{n1}) \quad (5.5.51)$$

Egyszerűen az történik, hogy ha elég sokáig várunk, akkor a fluktuáció spektrumából kiválasztódik az a frekvencia, amely éppen gerjeszteni tudja a rendszert.

Példaként tekintsünk egy hidrogén atomot, ahol a sugárzás a hőmérséklet kis változásaiból jön.

$$H'_{nm} = e \sum_i E_i(t) \langle n | \hat{x}_i | m \rangle \quad (5.5.52)$$

Az elektromos tér statisztikája időfüggetlen (a rendszer egyensúlyban van):

$$\overline{E_i(t) E_j(t)} = \delta_{ij} \int_{-\infty}^{\infty} P(\omega) e^{-i\omega(t_1-t_2)} d\omega \quad (5.5.53)$$

A  $\delta$  onnan jön, hogy nincs kitüntetett irány.  $\overline{E_i(t) E_j(t)}$  diagonalizálható lesz, kapunk három sajátvektort és mivel izotrópia van a sajátértékek egyenlőek és azokat már bele is definiáljuk a  $P(\omega)$ -ba!

(5.5.53)-ban a bal oldal valós és a  $t_1, t_2$  cseréjére szimmetrikus, ebből az következik, hogy  $P(\omega) = P(-\omega)$  és  $P(\omega) = P^*(\omega)$ .

$$\overline{H'_{nm}(t_1) H'^*_{nm}(t_2)} = e^2 |\langle n | \hat{\mathbf{x}} | m \rangle|^2 \int_{-\infty}^{\infty} P(\omega) e^{-i\omega(t_1-t_2)} d\omega \quad (5.5.54)$$

Tehát:

$$F_{nm}(\omega) = e^2 |\langle n | \hat{\mathbf{x}} | m \rangle|^2 P(\omega) \quad (5.5.55)$$

Innen:

$$\gamma(1 \rightarrow n) = \frac{2\pi e^2}{\hbar^2} |\langle n | \hat{\mathbf{x}} | m \rangle|^2 P(\omega_{n1}) d\omega \quad (5.5.56)$$

$P(\omega_{n1})$  a mező energiasűrűségével kapcsolatos, ugyanis a mező energiasűrűsége:

$$\rho = \frac{\varepsilon_0}{2} (E^2 + B^2) \quad (5.5.57)$$

Ha elektromágneses hullámról van szó, akkor  $\rho = \varepsilon_0 E^2$ . Kvantummechanikában az egységrendszer  $\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} = 1$ , így  $\rho = \frac{E^2}{4\pi}$ .

$$\bar{\rho} = \frac{1}{4\pi} \overline{E^2} = \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^3 \overline{E_i E_i} = \frac{3}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} P(\omega) d\omega = \frac{3}{2\pi} \int_0^{\infty} P(\omega) d\omega \quad (5.5.58)$$

Tehát  $P$  azt adja meg, hogy  $\omega$  és  $d\omega + \omega$  között mekkora az energiasűrűsége a rendszernek. Ezzel:

$$\gamma(1 \rightarrow n) = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} |\langle n | \hat{\mathbf{x}} | 1 \rangle|^2 \rho(\omega_{n1}) \quad (5.5.59)$$

Tegyük fel, hogy  $E_n > E_1$  az abszorpció rátája. Ha az indukált emisszióra vagyunk kíváncsiak, akkor

$$\gamma(n \rightarrow 1) = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} |\langle 1 | \hat{\mathbf{x}} | n \rangle|^2 \rho(\omega_{n1}) \quad (5.5.60)$$

### 5.5.4. Spontán emisszió

Sok hidrogén atom van egyensúlyban sugárzással. Minden atom vagy első vagy  $n$ -dik sajátállapotban van. Kérdés: melyikből mennyi van? Tegyük fel, hogy kezdetben  $N_1$  darab vagy az egyes állapotban és  $N_n$  van az  $n$ -dik állapotban.

Mivel egyensúly van 2 dolognak kell teljesülnie. Nem változik ezeknek a száma:  $\frac{dN_1}{dt} = \frac{dN_n}{dt} = 0$  és a számuk Boltzmann eloszlást követ, tehát meg tudjuk mondani az arányukat:

$$N_i \sim e^{-\beta E_i} \rightarrow \frac{N_1}{N_n} = e^{\beta(E_n - E_1)} = e^{\beta \hbar \omega_{n1}} \quad (5.5.61)$$

Mivel az előbb azt láttuk, hogy az indukált emisszióknak és az abszorpcióknak ugyanaz a rátája, ezért ellentmondásnak tűnik, hiszen ebből az következne, hogy  $N_1 = N_n$ . Ez csak úgy lehet, ha van még egy folyamat, nevezzük spontán emisszióknak.

Egyensúlyban:

$$0 = \frac{d\overline{N}_n}{dt} = -A\overline{N}_n - B_{n1}\overline{N}_n\rho(\omega_{n1}) + B_{1n}\overline{N}_1\rho(\omega_{n1}) \quad (5.5.62)$$

$A$  és  $B_i$  az Einstein együtthatók, ezeket keressük. A  $B_i$ -ket már meghatároztuk:

$$B_{1n} = B_{n1} = B \frac{4\pi e^2}{3\hbar^2} |\langle 1|\hat{\mathbf{x}}|n \rangle|^2 \quad (5.5.63)$$

Ahhoz, hogy  $A$ -t is meg tudjuk határozni, ahhoz be kell írunk a hőmérsékleti sugárzás törvényét  $\rho(\omega)$  helyére:

$$\rho(\nu)d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3 d\nu}{e^{\beta h\nu} - 1} \rightarrow \rho(\omega)d\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^2 d\omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \quad (5.5.64)$$

Használjuk fel azokat, amiket tudunk:

$$\overline{N}_1 = \overline{N}_n e^{\beta \hbar \omega_{n1}} \rightarrow 0 = -A\overline{N}_n - B_{n1}\overline{N}_n\rho(\omega_{n1}) + B_{1n}\overline{N}_1\rho(\omega_{n1}) \quad (5.5.65)$$

$$A = B\rho(\omega_{n1}) (e^{\beta \hbar \omega} - 1) = B \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \omega^3 \quad (5.5.66)$$

$$A = \frac{4e^2 \omega^3}{3\hbar c^3} |\langle 1|\hat{\mathbf{x}}|n \rangle|^2 \quad (5.5.67)$$

Ez a spontán emisszió rátája, időegységre jutó valószínűsége.

## 6. Kanonikus formalizmus és pályaintegrál

Eddig minden számunkra fontos fizikai mennyiséget szimmetriaelvekből származtattunk. Mit kell tenni abban az esetben, ha van egy klasszikus fizikai rendszerem és keresem a kvantumozott megfelelőjét?

Erre kétféle eljárást fogunk nézni, a kanonikus kvantálás és a Feynman-féle pályaintegrál.

## 6.1. Kanonikus kvantálás

Elsőként egy gyors klasszikus elméleti mechanikai emlékeztető.

Klasszikus fizikában a hatás az a Lagrange függvénynek az időintegrálja, amely függ az általános koordinátáktól és azok időderiváltjától. A mozgásegyenleteket a hatás minimumából kapjuk, ezeket nevezzük Euler-Lagrange mozgásegyenleteknek:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad (6.1.1)$$

Ahol be lehet vezetni az általánosított impulzust:  $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$  és az általánosított erőt:  $Q = \frac{\partial L}{\partial q_i}$ , amellyel kicsit tömörebb alakban lehet írni az egyenleteket:

$$\dot{p}_i = Q \quad (6.1.2)$$

Mit kell csinálni abban az esetben, ha van valamiféle szimmetriánk? Klasszikus mechanikában ha  $q_i \rightarrow q'_i = q_i + \varepsilon \mathcal{F}_i(q_i)$  szimmetriája a Lagrange-függvénynek, vagyis  $\delta L = 0$ , akkor

$$\delta L = \varepsilon \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} \mathcal{F}_i(q_i) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{\mathcal{F}}_i(q_i) = \varepsilon \left( \sum_i \left[ \dot{p}_i \mathcal{F}_i + p_i \dot{\mathcal{F}}_i \right] \right) = \varepsilon \frac{d}{dt} \sum_i p_i \mathcal{F}_i \quad (6.1.3)$$

ezt nevezzük Nöether-tételnek.

Speciális eset:  $\mathcal{F}_i(q_i)$  konstans. Ekkor  $\sum p_i = P$  a teljes impulzus megmarad.

Ha  $L$  nem invariáns, csak a hatás, akkor  $\delta L \neq 0$ , hanem valami teljes derivált, azaz

$$\frac{d}{dt} \left( \sum_i p_i \mathcal{F}_i - G \right) = 0 \quad (6.1.4)$$

A következő lépés, hogy bevezetjük a Hamilton-függvényt:

$$H = \sum_i \dot{q}_i p_i - L \quad (6.1.5)$$

Ez a mennyiség azért jó, mert ha kiszámolom az időderiváltját, akkor az pont a Lagrange-függvény időderiváltja lesz, tehát ha a Lagrange-függvény nem függ explicit az időtől, akkor  $H$  megmarad (energia).

A Hamilton-függvénnyel is fel lehet írni a mozgásegyenleteket:

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (6.1.6)$$

Ez kétszer  $n$  darab elsőrendű egyenlet.

Kvantummechanikában legyenek  $q_i$ -k az általánosított koordináták és csináljunk rajtuk egy transzformációt,  $q'_i \rightarrow q_i + \varepsilon \mathcal{F}_i(q_i)$ . Korábban láttuk, hogy minden szimmetriához tartozott egy  $\hat{U}$  unitér transzformáció, ami azt csinálja, hogy  $\Psi \rightarrow \hat{U}\Psi$ . Vagy, ami ezzel ekvivalens, az operátorok változnak:  $\hat{A} \rightarrow \hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{U}$ .

Mivel kvantummechanikában vagyunk, legyen  $q_i \rightarrow \hat{q}_i$ , ami azt tudja, hogy  $\hat{U}^{-1}\hat{q}_i\hat{U} = \hat{q}_i + \varepsilon \mathcal{F}_i(\hat{q}_i)$ . Itt  $\mathcal{F}$  olyan értelemben operátor, hogy a hasában egy operátor fekszik. Ha  $\varepsilon$  kicsi:

$$\hat{U} = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{F} \quad (6.1.7)$$

Itt  $\hat{\mathcal{F}}$  a szimmetria generátora. Ez lesz a hermitikus operátor, amely egy megmaradó mennyiséggel kapcsolatos. Ha ezt az transzformációba betesszük, és  $\varepsilon$  rendig kifejtjük, akkor:

$$[\hat{F}, \hat{q}_i] = -i\hbar \mathcal{F}_i(\hat{q}) \quad (6.1.8)$$

Másrészt szeretnénk, hogy  $\hat{F}$  továbbra is olyan kapcsolatban legyen az impulzusokkal, mint klasszikus fizikában, azaz

$$\hat{F} = \sum_i p_i \mathcal{F}_i(\hat{q}) \quad (6.1.9)$$

Ez akkor fog teljesülni, ha magára a koordinátára és az impulzusra kiszabunk egy kommutációs relációt:

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0 \quad (6.1.10)$$

Akármilyen általánosított koordinátákat vezetünk be, akkor a szimmetriából következő mennyiségek akkor lesznek analógak a klasszikus fizikával, ha ezek a kommutációs relációk érvényesek.

Ezek után vegyük  $q_i$  és  $p_i$  tetszőleges analitikus függvényét. Állítás, ennek a függvénynek operátor értelemben:

- $[f(\hat{q}_i, \hat{p}_i), \hat{q}_i] = -i\hbar \frac{\partial f}{\partial \hat{p}_i}$
- $[f(\hat{q}_i, \hat{p}_i), \hat{p}_i] = i\hbar \frac{\partial f}{\partial \hat{q}_i}$

Ezt úgy lehet látni, hogy be kell írni az  $n$  darab  $p$ -t. Amikor egy kommutálást csinálunk, akkor mindig bejön egy  $i\hbar$  és a végén eltűnik a  $p$ , mert mindig eggyel kevesebb  $p$ -t viszek magammal. És ez éppen az  $f$  függvény deriváltja lesz sorfejtett alakban.

Vegyük egy speciális függvényt:  $f$  legyen maga a Hamilton-függvény!

Tudjuk, hogy  $\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$  és  $\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$ , ami persze operátorokra is igaz. Ezeket felhasználva:

$$\frac{d}{dt} \hat{p}_i = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}_i] \quad (6.1.11)$$

és

$$\frac{d}{dt} \hat{q}_i = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{q}_i] \quad (6.1.12)$$

Ez azt mutatja, hogy  $\hat{H}$  tényleg az időeltolás generátora. Ha  $\hat{p}$ -re és  $\hat{q}$ -ra így van, akkor minden  $f$ -re igaz, hogy

$$\frac{d\hat{f}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{f}] \quad (6.1.13)$$

Állítás:  $f(\hat{q}, \hat{p})$  és  $g(\hat{q}, \hat{p})$  kommutátora:

$$[f, g] = i\hbar \sum_i \left\{ \frac{\partial f}{\partial \hat{q}_i} \frac{\partial g}{\partial \hat{p}_i} - \frac{\partial g}{\partial \hat{q}_i} \frac{\partial f}{\partial \hat{p}_i} \right\} \quad (6.1.14)$$

Vagyis két tetszőleges függvény kommutátora éppen  $i\hbar$ -szor a két függvény Poisson-zárójele.

Ha csinálunk egy kanonikus transzformációt, erre a Poisson-zárójel invariáns.

## 6.2. Feynman-féle pályaintegrál

Nem meglepő módon ez Feynman-tól származik. Analóg a hullámoptikával. Régen azt hitték, hogy ez másik, Schrödingertől teljesen független felépítése a kvantummechanikának. De nem.

Egyszerűsítésekkel élünk: egy dimenziós nem relativisztikus részecskét tekintünk. Legyen a részecske kezdetben a  $|y\rangle$  helyen (állapotban). Hullámfüggvény-nyelven ez egy dirac-delta. Kérdés:  $t$  idő eltelte után milyen valószínűséggel találjuk a részecskét az  $|x\rangle$  helyen (állapotban)?

Lényegében az időeltolást kell alkalmazni:  $\hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$  ez hat a kezdeti állapotra, tehát az állapotom  $t$  idő elteltével:

$$\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |y\rangle \quad (6.2.1)$$

Legyen  $A = \langle x | \hat{U} | y \rangle$ , ezzel a keresett valószínűség  $P(y \rightarrow x) = |A|^2$ . Igazából  $A$ -t keressük, mert ez több infót tartalmaz.

A klasszikus megoldás: van egy hatás és ott kell extremalizálni.

Nézzünk egy szabad részecskét, akkor a Hamiltoni:  $\frac{\hat{p}^2}{2m}$ , ekkor:

$$A = \left\langle x \left| e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} t} \right| y \right\rangle \quad (6.2.2)$$

Szűrjünk be egy egyest:  $\int dp = |p\rangle \langle p|$ , ugyanis ezzel az impulzusoperátor leteszi a kalapját, felveszi sajátártékét és máris ki lehet emelni, mert már csak egy szám lesz.

$$A = \int dp e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} \langle x | p \rangle \langle p | y \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} e^{i(x-y)^2 \frac{m}{2\hbar t}} \quad (6.2.3)$$

Általában, ha van kölcsönhatás, az nem kommutál a Hamilton-operátorral. Bevezetünk ezért egy olyan  $U_\varepsilon$  mennyiséget, ami csak kis időközöket léptet. Az az állítás, hogy ez már közelíthető  $V_\varepsilon$ -nal  $\varepsilon^3$  rendig:

$$U_\varepsilon = W_\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \quad W_\varepsilon = e^{-\frac{i}{\hbar} V \frac{\varepsilon}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 \varepsilon} e^{-\frac{i}{\hbar} V \frac{\varepsilon}{2}} \quad (6.2.4)$$

Ennek a  $W_\varepsilon$ -nak számoljuk ki a mátrixelemét és ilyenekből építjük fel az egészet:

$$\langle x | W_\varepsilon | y \rangle = \left\langle x \left| e^{-\frac{i}{\hbar} V \frac{\varepsilon}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 \varepsilon} e^{-\frac{i}{\hbar} V \frac{\varepsilon}{2}} \right| y \right\rangle = \quad (6.2.5)$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar} (V(x)+V(y)) \frac{\varepsilon}{2}} \left\langle x \left| e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 \varepsilon} \right| y \right\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \varepsilon \hbar}} e^{i \left( \frac{m}{2\varepsilon} (x-y)^2 - \varepsilon (V(x)+V(y)) \right)} \quad (6.2.6)$$

Meg lehet mutatni, hogy ha  $\varepsilon = \frac{t}{N}$ , akkor

$$\lim_{N \rightarrow \infty} W_\varepsilon = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \quad (6.2.7)$$

Tehát felosztjuk  $t$ -t  $N$  részre és ezzel:

$$A \left\langle x \left| e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \right| y \right\rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle x | W_\varepsilon^N | y \rangle \quad (6.2.8)$$



Egy ilyen  $W_\varepsilon$ -nak jól ismerjük a mátrixelemeit, ha mindegyik után lenne egy hely sajátállapot, akkor sokkal könnyebb dolgunk lenne. Ezért beszélünk  $N - 1$  db  $|x_i\rangle \langle x_i|$ -t:

$$A = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1} \langle x | W_\varepsilon | x_{N-1} \rangle \langle x_{N-1} | W_\varepsilon | x_{N-2} \rangle \dots \langle x_1 | W_\varepsilon^N | y \rangle \quad (6.2.9)$$

$$A = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi i \varepsilon \hbar} \right)^{N/2} e^{\frac{i}{\hbar} S_\varepsilon} \quad (6.2.10)$$

ahol

$$S_\varepsilon = \frac{m}{2\varepsilon} [(x - x_{N-1}^2) + (x_{N-1} - x_{N-2})^2 + \dots + (x - y)^2] - \frac{\varepsilon}{2} (V(x) + 2V(x_{N-1}) + \dots + 2V(x_1) + V(y)) \quad (6.2.11)$$

$$S_\varepsilon = \sum_{i=0}^{N-1} \varepsilon \frac{m}{2} \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{\varepsilon^2} - \varepsilon \left( \frac{V(x)}{2} + V(x_{N-1}) + \dots + V(x_1) + \frac{V(y)}{2} \right) \quad (6.2.12)$$

Vegyük észre, hogy az összeg második tagja elég erősen emlékeztet a trapéz-szabályra, az első tag pedig éppen a kinetikus energia! Ezzel:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} S_\varepsilon \int_0^t dt' \left( \frac{mv^2}{2} - V \right) \quad (6.2.13)$$

Ez meg ugye pont a klasszikus hatás. Ezzel azt kapjuk végül, hogy:

$$A = \int [Dx] e^{iS/\hbar} \quad (6.2.14)$$

ahol  $[Dx] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi i \varepsilon \hbar} \right)^{N/2} dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1}$ .

Ennek egyik nagy haszna, hogy a klasszikus határeset jól látható. Ha közeledünk a makroszkopikus világhoz, akkor  $\hbar$  tart nullához, formálisan. Ekkor visszakapjuk a klasszikus mechanikából ismert hatást.

Ha  $N$  elég nagy, akkor ez vadul oszcillálni fog, tipikusan kiejtik egymást a tagok, tipikusan ott lesz ennek értéke, ahol  $S$  érzékeny a pálya megválasztására: kiválasztódik az a pálya, amely aztán megvalósul, mint mozgás.

Van ezzel azonban néhány apróbb probléma. Van egy  $i$  az egyenletben, amiből az következik, hogy ez forogni fog a komplex síkban, az exponens is oszcillál, ezt nehéz integrálni. Éppen ezért nem ezt alakot szokták használni, hanem alkalmaznak egy trükköt.  $A(t)$ -t kiterjesztik a komplex síkra, úgy, hogy  $t = -i\tau$ , ahol  $\tau$  valós, euklideszi idő. Ezzel az exponens még mindig korlátos lesz, hiszen a Hamilton operátor is az.

$$A(\tau) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi i \varepsilon \hbar} \right)^{N/2} \int dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1} e^{-\frac{1}{\hbar} S_E} \quad (6.2.15)$$

ahol

$$S_E = -iS = \int_0^\tau d\tau' \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{\partial x}{\partial t} \right)^2 + V(x(\tau)) \right] \quad (6.2.16)$$

Ezt hívjuk euklideszi hatásnak. Ez a pályaintegrál már sokkal jobban definiált. Az eljárás az, hogy elsőként meghatározzák  $A(\tau)$ -t és utána ebből csinálnak egy elfolytatást  $A(t)$ -re.

## 7. Szórás számítás

### 7.1. 1D-s szórás

Az dönti el, hogy szórás, vagy kötött állapot jön-e létre, hogy hogyan viszonyul egymáshoz a részecske energiája és a potenciál. Ha a részecske energiája nagyobb, mint a potenciál az egész mozgás során, akkor lesz szórás.

Ha a potenciál a végtelenben a nullához konvergál, akkor ott megtudjuk oldani az egyenleteket, hiszen csak szabad részecskére kell gondolni, ott síkhullámok lesznek. Mint már korábban említettük a síkhullámra lehet úgy gondolni, mint egy bizonyos intenzitású részecskenyalábra.

Amikor megoldjuk az egyenletet, azt mindig tartományonként vizsgáljuk, majd a határfeltételeknek megfelelően összeillesztjük. Mivel a Schrödinger-egyenlet lineáris, az együtthatók között egy lineáris összefüggést várunk.

Tehát lecsengő potenciál esetén a végtelenben a következő megoldást kapjuk:

$$\Psi(x \rightarrow -\infty) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (7.1.1)$$

$$\Psi(x \rightarrow +\infty) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \quad (7.1.2)$$

Ahol  $A$  és  $B$  bejövő síkhullám amplitúdója,  $F$  és  $G$  pedig a kimenőé. Ezek között keresünk lineáris kapcsolatot, nevezzük ezt *szórás mátrixnak*.

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{pmatrix} \quad (7.1.3)$$

Ezzel feltudjuk írni a kapcsolatot az amplitúdók között:

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix} \quad (7.1.4)$$

Ha a Schrödinger-egyenletben  $\hat{H}$  nem függ az időtől, akkor a formális megoldás:

$$\hat{H}\Psi(x) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi \quad (7.1.5)$$

$$\Psi = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \Psi(t=0) \quad (7.1.6)$$

Állítás:  $\mathbf{S}$  unitér, megtartja a vektornormát. Ez azt jelenti, hogy  $|B|^2 + |F|^2 = |G|^2 + |A|^2$ . Ha jobbról nincs bejövő részecskenyaláb, akkor  $G = 0$  és  $|B|^2 + |F|^2 = |A|^2$ .

$$\frac{|B|^2}{|A|^2} + \frac{|F|^2}{|A|^2} = 1 \quad (7.1.7)$$

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} \rightarrow \text{visszaverődési együttható} \quad (7.1.8)$$

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} \rightarrow \text{áthatolási együttható} \quad (7.1.9)$$

Az előzőek alapján  $R + T = 1$ , amely megnyugtató válasz a valószínűségi értelmezés híveinek.

### 7.1.1. Szórás véges potenciálgödörben

Balról érkező részecskenyalábot vizsgálunk a ?? ábrán látható potenciálgödörben. Értelemszerűen három részre osztva vizsgáljuk a megoldásokat:

$$\begin{aligned}
 I. \quad \Psi(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & k &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\
 II. \quad \Psi(x) &= ce^{ilx} + De^{-ilx} & l &= \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \\
 III. \quad \Psi(x) &= Fe^{ikx}
 \end{aligned}$$

Határfeltételek:

$$\begin{aligned}
 \Psi_I(-a) &= \Psi_{II}(-a) \\
 \Psi'_I(-a) &= \Psi'_{II}(-a) \\
 \Psi_I(a) &= \Psi_{II}(a) \\
 \Psi'_I(a) &= \Psi'_{II}(a)
 \end{aligned}$$

Ezeket kiírva egy lineáris egyenletrendszer kapunk, a körülményes, de triviális számolás után:

$$F = \frac{e^{-2ika} A}{\cos(la) - i \frac{\sin(2la)}{2kl} (k^2 + l)} \quad (7.1.10)$$

Ha ismerem a teljes  $\mathbf{S}$  mátrixot, akkor abból tudok következtetni a kötött állapotokra is. Ugyanis vizsgáljuk meg mi történik, ha csökken az energia! Ha lemegy nulla alá, akkor  $e^{ikx} \rightarrow e^{\kappa x}$  (hiszen ekkor a gyökjel alatt negatív áll). És lesz még egy extra feltételünk: ha kötött állapotokat keresünk, akkor a hullámfüggvény legyen normálható! Azaz  $A, G$  legyen nulla.

Ez a szórási mátrix nyelvén kiírva:

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \mathbf{S} \cdot \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix} \quad (7.1.11)$$

Ez csak úgy lehet, ha  $\mathbf{S}$  divergál. Ez akkor történik meg, ha a nevező nulla.

$$\cos(2la) - i \frac{\sin(2la)}{2\kappa l} (l^2 - k^2) = 0 \quad (7.1.12)$$

$$\operatorname{ctg}(2la) = \frac{l^2 - \kappa^2}{2\kappa l} \rightarrow \kappa = \frac{\sqrt{2m(-E)}}{\hbar} \quad l = \frac{\sqrt{2m(V_0 + E)}}{\hbar} \quad (7.1.13)$$

Ez egy transzcendens egyenlet, csak bizonyos energiák esetén van értelme.

## 7.2. 3D-s szórás

Az első fontos fogalom a három dimenziós szórásszámításhoz a hatáskeresztmetszet. A ?? ábrán látható elnevezésekkel bevezethetjük a differenciális hatáskeresztmetszetet és a teljes (totális) hatáskeresztmetszetet:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \quad (7.2.1)$$

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (7.2.2)$$

Van más módja is a felírásnak, ha van egy nyalábunk, akkor annak a luminozitása (áramsűrűsége)  $\mathbf{j}$ , az időegységenként egységnyi felületen átmenő részecskék száma. Ha megnézzük, hogy időegységenként hány db részecske megy át a felületen, akkor:

$$dN = d\sigma j = j \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{j} \frac{dN}{d\Omega} \quad (7.2.3)$$

Kvantummechanikában felteszünk néhány dolgot: van egy  $V(r)$  gömbszimmetrikus potenciálunk, amely véges hatótávolságú, vagyis  $V(r) \approx 0$ , ha  $r$  nagyobb egy karakterisztikus  $R$  távolságnál. Ez alatt azt kell érteni, hogy gyorsabban cseng le, mint az  $1/r^2$ .

A bejövő részecskéink jöjjenek a  $z$  irányból.

Mi lenne a korrekt eljárás? Van egy teljes Hamilton operátorunk, a bejövő részecskék hullámcsomagjára fel kellene írni, mégpedig olyanra, hogy  $t$  tart  $-\infty$  esetén messze van a szórócentrumtól, ez lenne a kezdőfeltétel.

Folytonos nyalábot tételezünk fel, amely folyamatosan jön balról (stacionárius állapot). Ehhez már elég az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet, csak a határfeltételeket kell jól átgondolni.

Síkhullámot tételezünk fel  $-z$  irányból:

$$\Psi_{in} = Ae^{i\frac{p}{\hbar}z} \quad (7.2.4)$$

Lesz egy szórt hullám, ami gömbhullámként képzelünk el távolodva a centrumtól. Hogy kell megoldani a Schrödinger-egyenletet? Szét kell választani a változókat:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \frac{U(r)}{r} f(\theta, \varphi) \quad (7.2.5)$$

Most  $\Psi$  nem feltétlenül  $\hat{L}^2$  sajátállapot, így  $f$  nem feltétlenül a gömbfüggvényekkel egyezik meg, de felírható azok lineárkombinációjaként. Ebből következett a radiális Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2U}{dr^2} + \left( V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) U = EU \quad (7.2.6)$$

Ha  $r$  tart a végtelenbe, akkor már a sugárzási zónában vagyunk, mi történik ekkor? A potenciál ugye gyorsan levág, tehát  $V(r) = 0$  és minden  $1/r^2$ -es tag a nullához tart. Ez végül egy szabad Schrödinger-egyenletet fog adni, aminek a megoldása:

$$U(r) = Ae^{ikr} + Be^{-ikr} \quad k = \frac{\sqrt{2Em}}{\hbar} = \frac{p}{\hbar} \quad (7.2.7)$$

Mivel semmit nem várunk befelé, ezért  $B = 0$ .

Meg tudjuk mondani, hogy mi a hullámfüggvény alakja  $r$  tart végtelenre:

$$\Psi(r \rightarrow \infty) = \frac{U(r)}{r} f(\theta, \varphi) \rightarrow e^{ikr} \frac{f}{r} \quad (7.2.8)$$

Mitől függhet  $f$ ? Függhet a szögektől, meg a bejövő impulzustól. De most a potenciál centrális, ezért nyilván a szórt nyaláb is gömbszimmetrikus, tehát nem függhet  $\varphi$ -tól.

Ezzel már meg tudjuk mondani, hogy olyan alakban keressük a megoldást, hogy van egy bejövő síkhullám és van egy szórt gömbhullám.

$$\Psi = A \left( e^{i\frac{p}{\hbar}z} + f(\theta) \frac{e^{i\frac{p}{\hbar}r}}{r} \right) \quad (7.2.9)$$

Ha megoldjuk ilyen alakban, akkor mi lesz a hatáskeresztmetszet? (7.2.3)-as alakot fogjuk használni:

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \Psi - \psi \nabla \Psi^*) \quad (7.2.10)$$

A bejövő áramunk a síkhullámból jön:

$$j_{in} = -\frac{i\hbar}{2m} |A|^2 \left( e^{-i\frac{p}{\hbar}z} i \frac{p}{\hbar} e^{i\frac{p}{\hbar}z} - e^{i\frac{p}{\hbar}z} \left( -i \frac{p}{\hbar} \right) e^{-i\frac{p}{\hbar}z} \right) = \frac{p}{m} |A|^2 \quad (7.2.11)$$

Ez nagyon szemléletes, éppen a sebesség szorozva a bejövő nyaláb luminozitásával. Ez a  $d\Omega$  térszögben időegységenként szórt részecskék száma. Ha elmegyünk nagyon messzire, akkor  $dA = r^2 d\Omega$  és a részecskék száma  $dN = dA j_r = r^2 j_r d\Omega$ .

$$j_r = -\frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi_{sz}^* \frac{\partial}{\partial r} \Psi_{sz} - \Psi_{sz} \frac{\partial}{\partial r} \Psi_{sz}^* \right) \quad (7.2.12)$$

ahol

$$\Psi_{sz} = A f(\theta) \frac{e^{i\frac{p}{\hbar}r}}{r} \quad (7.2.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \Psi_{sz} = A f_p(\theta) \left[ -\frac{1}{r^2} + i \frac{p}{\hbar} \frac{1}{r} \right] e^{i\frac{p}{\hbar}r} \quad (7.2.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \Psi_{sz}^* = A^* f_p^*(\theta) \left[ -\frac{1}{r^2} - i \frac{p}{\hbar} \frac{1}{r} \right] e^{-i\frac{p}{\hbar}r} \quad (7.2.15)$$

Ezzel:

$$j_r = \frac{p}{m} \frac{1}{r^2} |A|^2 |f_p(\theta)|^2 \quad (7.2.16)$$

$$dN = \frac{p}{m} \frac{1}{r^2} |A|^2 |f_p(\theta)|^2 d\Omega \quad (7.2.17)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{j} \frac{dN}{d\Omega} = |f_p(\theta)|^2 \quad (7.2.18)$$

Persze akkor már rögtön fel tudjuk írni a totális hatáskeresztmetszetet:

$$\sigma = \int |f_p(\theta)|^2 d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta |f_p(\theta)|^2 d\theta = 2\pi \int_0^\pi \sin \theta |f_p(\theta)|^2 d\theta = 2\pi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) |f_p(\theta)|^2 d\theta$$

Mostantól az a kérdés, hogy adott  $V(r)$  potenciálhoz mi lesz az  $f_p(\theta)$ ? Mivel a megoldásunk csak  $r$  tart végtelen esetén érvényes, ezért meg kell oldani a Schrödinger-egyenletet középen is.

### 7.2.1. Parciális hullámanalízis

A teljes Schrödinger-egyenletet szétbontjuk gömbfüggvényekre és felírjuk gömbi koordinátákban. Megnézzük, hogy  $r$  tart végtelen esetén hogy viselkedik és azt összevetjük (7.2.9) alakkal.

Mivel forgási szimmetria van, minden gömbfüggvényből csak  $l \neq 0$  fog kelleni, ezek pedig a  $P_l(\cos \theta)$  polinomok:

$$\Psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l \frac{U(r)}{r} P_l(\cos \theta) \quad (7.2.19)$$

Továbbra sem megyünk be a szórócentrum közepébe, azt a részt nézzük meg, mikor már kívül vagyunk a szórócentrumon, de még nem a végtelenben, tehát ilyenkor:

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2 U}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} U = EU = \frac{p^2}{2m} U = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} U \quad (7.2.20)$$

Ezt átrendezve:

$$\frac{d^2 U}{dr^2} + \left[ k^2 - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2} \right] U = 0 \quad (7.2.21)$$

Ha ezt átírjuk  $R = \frac{U}{r}$  segítségével, akkor ez pont a Bessel-egyenlet lesz, ennek a megoldásai a szférikus Bessel-illetve Neumann-függvények:

$$U(r) = Br j_l(kr) + Cr N_l(kr) \quad (7.2.22)$$

Minket főleg ezek aszimptotikus viselkedése érdekel. Ha  $kr$  sokkal kisebb, mint 1, akkor

$$j_l(kr) \approx \frac{(kr)^l}{1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (2l+1)} \quad (7.2.23)$$

$$N_l(kr) \approx -\frac{1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (2l-1)}{(-kr)^{l-1}} \quad (7.2.24)$$

Ha pedig  $(kr)$  nagyon nagy:

$$j_l \approx \frac{1}{kr} \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) \quad (7.2.25)$$

$$N_l \approx \frac{-1}{kr} \cos \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) \quad (7.2.26)$$

Tehát ha nagy távolságokra vagyunk és az energia is nagy, akkor:

$$U(r) = B \frac{1}{k} \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) - C \frac{1}{k} \cos \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) = \frac{A}{k} \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) \quad (7.2.27)$$

Miért jó ez az utolsó alak azzal a trükkös fázissal? Meg kell nézni azt az esetet, amikor nincsen szórás, ekkor minden  $r$ -re a Bessel-egyenletünk lesz. Ilyenkor fontos, hogy  $N_l$  nem normálható, tehát  $C$  muszáj nulla legyen.

$$U(r) = \frac{A}{k} \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) \quad (7.2.28)$$

$\delta$  tehát éppen azt mondja meg, hogy a szabad esethez képest mennyivel változott meg a hullám fázisa. Fejezzük ki  $B$  és  $C$  együtthatókat  $A$ -val:

$$U(r) = \frac{A}{k} \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) = \frac{A}{k} \cos \delta_l \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) + \frac{A}{k} \sin \delta_l \cos \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) \quad (7.2.29)$$

Az együtthatókat csak le kell olvasni:

$$B = A \cos \delta_l \quad C = -A \sin \delta_l \quad (7.2.30)$$

Ezzel felírható a megoldás mindenütt, ahol  $r > R$ :

$$U(r) = Br j_l(kr) + Cr N_l(kr) = Ar \cos \delta_l j_l(kr) - Ar \sin \delta_l N_l(kr) \quad (7.2.31)$$

$$U(r) = \sum_l \underbrace{a_l A}_{\text{egybeolvasztjuk}} [r \cos \delta_l j_l(kr) - r \sin \delta_l N_l(kr)] P_l(\cos \theta) \quad (7.2.32)$$

$$U(r \rightarrow \infty) = \sum_l a_l \left[ \cos \delta_l \frac{\sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right)}{kr} + \sin \delta_l \frac{\cos \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right)}{kr} \right] P_l(\cos \theta) \quad (7.2.33)$$

Most már összehasonlíthatjuk (7.2.9) alakkal. Azt is fel kell bontani a Legendre-polinomok szerint.

Az első tag síkhullám:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \approx \sum_l i^l (2l+1) \frac{\sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right)}{kr} P_l(\cos \theta) \quad (7.2.34)$$

Kifejtjük  $f_p$ -ket is:

$$f_p(\theta) = \sum_l (2l+1) f_l(p) P_l(\cos \theta) \quad (7.2.35)$$

Ekkor:

$$\Psi(r \rightarrow \infty) = A \sum_l \left[ i^l (2l+1) \frac{\sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right)}{kr} + (2l+1) k f_l(p) \frac{e^{ikr}}{kr} \right] P_l(\cos \theta) \quad (7.2.36)$$

Már alakul, már csak a gömbhullámot kéne átírni sin és cos szorzatokra:

$$e^{ikr} = e^{i \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right)} e^{i \frac{l\pi}{2}} = i^l \left( \cos \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) + i \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) \right) \quad (7.2.37)$$

Írjuk vissza és válasszuk le az együtthatókat:

$$\Psi = \sum_l A \left\{ i^l (2l+1) \left[ 1 + ik f_l(p) \right] \frac{\sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right)}{kr} + i^l (2+1) k f_l(p) \frac{\cos \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right)}{kr} \right\} P_l(\cos \theta) \quad (7.2.38)$$

A két alakot összevetve leolvashatjuk, hogy:

$$\Psi = \sum_l a_l \left( \cos \delta_l \frac{\sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right)}{kr} + \sin \delta_l \frac{\cos \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right)}{kr} \right) \quad (7.2.39)$$

$$\cot \delta_l = \frac{1 + ikf_l(p)}{kf_l(p)} \rightarrow f_l = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) = \frac{1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l = \frac{1}{k} t_l \quad (7.2.40)$$

ahol  $t_l$  az  $l$ -dik parciális hullám amplitúdója.

Sok közelítés volt a számolás során, de a vége egzakt:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_p(\theta)|^2 = \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1) f_l f_{l'}^* P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = \quad (7.2.41)$$

$$= \sum_{l,l'} \frac{1}{k^2} [(2l+1)(2l'+1) \sin \delta_l \sin \delta_{l'} e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta)] \quad (7.2.42)$$

A totális hatáskeresztmetszet már egyszerűbb, mert

$$\int_{-1}^1 d(\cos \theta) P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (7.2.43)$$

azaz:

$$\sigma = 2\pi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) |f_p(\theta)|^2 = 2\pi \frac{1}{k^2} \sum_l 2(2l+1) \sin^2 \delta_l = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (7.2.44)$$

Vagy impulzussal kifejezve:

$$\sigma = \frac{4\pi \hbar^2}{p^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (7.2.45)$$

Ennek az egésznek csak akkor van persze értelme, amikor kevés tag ad csak járulékot. Mikor van ez így? Amikor alacsony energiás a szórás véges hatótávolságú potenciállal.

Abból, hogy az energia sokkal kisebb, mint a potenciál abszolút értéke, következik, hogy a  $\Psi$  független az energiától. Tehát  $kr$  legyen kicsi, de persze annak is teljesülnie kell, hogy messze vagyunk a potenciáltól. Ilyenkor lehet használni a másik aszimptotikus alakokat. azokat visszaírva kapjuk, hogy

$$\Psi \approx \sum_l a_l [\cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l N_l(kr)] P_l = \sum_l a_l \cos \delta_l [j_l(kr) - \tan \delta_l N_l] P_l \quad (7.2.46)$$

Nagyon más a  $k$  függés, akkor tud ez  $k$  független lenni, ha  $\tan \delta_l \approx k^{2l+1} \cdot \text{const}$ . Ha  $k$  kicsi, akkor  $\tan \delta_l$ -ek kicsik lesznek és csak az  $s$  hullám fog dominálni.

$$\tan \delta_0 \rightarrow a_0 k \quad (7.2.47)$$

ahol  $a_0$  a szórási hossz.

Első példánk a merev gömbön való szórás  $s$  hullám közelítésben, ekkor a potenciál:

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r < R \\ 0 & r > R \end{cases} \quad (7.2.48)$$

$$\Psi = A \left( e^{ikz} + f_0 \frac{e^{ikr}}{r} \right) \quad (7.2.49)$$



Tudjuk, hogy  $r = R$  esetén  $\Psi = 0$ . Kis energiás szórást vizsgálunk, tehát  $kr \ll 1$ . Ekkor a tagokat sorba lehet fejteni:

$$e^{ikz} \approx 1 \quad \frac{e^{ikR}}{R} \approx \frac{1}{R} \quad (7.2.50)$$

$$\Psi(R) = A \left( 1 + f_0 \frac{1}{R} \right) = 0 \rightarrow f_0 = -R = \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin \delta_0 \rightarrow Rk \approx -\delta_0 \quad (7.2.51)$$

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega^2} = |f_0|^2 = R^2 = a_0^2 \quad (7.2.52)$$

$$\sigma = \int \frac{d^2\sigma}{d\Omega^2} d\Omega^2 = 4\pi a_0^2 \quad (7.2.53)$$

Általában is igaz, hogy ha  $a_0^2$  megvan, akkor  $\sigma = 4\pi a_0^2$ .

Előfordulhat olyan eset, amikor  $\delta_l$  függ a  $k$ -től és a  $\cos \delta_l = 0$  valamilyen energiára. Ilyenkor nem emelhetünk ki, hiszen akkor a  $\tan \delta_l$  divergál. Ez általában csak egy adott  $l$ -re teljesül, a többi  $l$ -re továbbra is igaz, hogy  $\tan \delta_l \approx k^{2l+1}$ .

Konkrét példa a ?? ábrán látható potenciál, ahol a Dirac-féle deltafüggvény együtt-hatója legyen  $\frac{\hbar^2}{2m}\sigma$ , dimenzionális okokból. Világos, hogy ez egy olyan potenciál, ahol negatív energiákra lehet kötött állapot, pozitív energiára lehetetlen, mert ez egy véges potenciálgát.

S hullám közelítésben vagyunk, azaz az energia sokkal kisebb, mint a potenciál abszolút értéke és  $kr \ll 1$ , ahol most  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ . Bevezetünk még egy hasonló mennyiséget, legyen  $\kappa = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$ . A  $\kappa$  és  $k$  között van egy kapcsolat:  $\kappa^2 = \kappa_0^2 + k^2$ , ahol  $\kappa_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar$ .

Tehát van három konstansom, amelyet hangolni kell. Két tartományt fogunk vizsgálni az ábrának megfelelően. Az erre vonatkozó Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2U}{dr^2} + VU = EU \quad (7.2.54)$$

Határfeltételünk:  $r \rightarrow 0$  esetén  $U(r) \sim r^{l+1} = r$ , tehát csak a szinuszos tagot engedjük meg.

$$\text{I. } U(r) = \sin \kappa r \quad (7.2.55)$$

$$\text{II. } U(r) = Ae^{ikr} + Be^{-ikr} = C \cdot \sin(kr + \delta_0) \quad (7.2.56)$$

Illesztési feltétel:  $r = R$ -ben:

- $U(r)$  folytonos
- $\Delta U'(r) = \sigma U(R)$

Helyettesítsünk be:

$$\sin \kappa R = Ae^{ikR} + Be^{-ikR} \quad (7.2.57)$$

A másik a deriváltak különbsége:

$$Aike^{ikr} - ikBe^{-ikr} - \kappa \cos \kappa R = \sigma \sin \kappa R \quad (7.2.58)$$

Ebból az lesz, hogy:

$$Ae^{ikR} - Be^{-ikR} = -\frac{i}{k} (\kappa \cos \kappa R + \sigma \sin \kappa R) \quad (7.2.59)$$

Ebból a két egyenletből megkapjuk az együtthatókat:

$$A = \frac{1}{2} e^{-ikR} \left( \sin \kappa R - \frac{i}{k} (\kappa \cos \kappa R + \sigma \sin \kappa R) \right) \quad (7.2.60)$$

$$B = \frac{1}{2} e^{ikR} \left( \sin \kappa R + \frac{i}{k} (\kappa \cos \kappa R + \sigma \sin \kappa R) \right) \quad (7.2.61)$$

Most szeretnénk felírni ezek segítségével a fáziseltolást:

$$Ae^{ikr} + Be^{-ikr} = C \cdot \sin(kr + \delta_0) = C(\cos \delta_0 \sin kr + \sin \delta_0 \cos kr) \quad (7.2.62)$$

Ebból könnyű meghatározni a fáziseltolás kotangensét:

$$\cot \delta_0 = \frac{i(A - B)}{A + B} = \frac{kr \sin \kappa R \sin kR + (\kappa R \cos \kappa R + \sigma R \sin \kappa R) \cos kR}{kR \sin \kappa R \cos kR - (\kappa R \cos \kappa R + \sigma R \sin \kappa R) \sin kR} \quad (7.2.63)$$

Be lehet lőni úgy a  $\sigma$ -t és  $\kappa$ -t, hogy a számlálónak kicsi  $k$ -re is legyen zérushelye. Ha  $kR \ll 1$ , akkor:

$$\cot \delta_0 \approx \frac{1}{kR} (a + b(kR)^2) \quad (7.2.64)$$

Ha pont úgy jönnek ki a konstansok, hogy  $(a + b(kR)^2) = 0$ , akkor van rezonancia. Ilyenkor sorbafejtjük a kotangens 0 körül:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow E_r = \frac{\hbar^2}{2m} \left( -\frac{a}{bR^2} \right) \quad (7.2.65)$$

Ilyenkor  $\cot \delta_0(E)$  sorbafejthető  $E_r$  körül:

$$\cot \delta_0(E) = -\frac{2}{\Gamma} (E - E_r) \quad (7.2.66)$$

Írjuk fel a hatáskeresztmetszetet, az ugye  $\sin^2 \delta_0$ -nal megy:

$$\cot^2 \delta_0(E) = -\frac{1 - \sin^2 \delta_0}{\sin^2 \delta_0} \rightarrow \sin^2 \delta_0 = \frac{1}{1 + \cot^2 \delta_0} = \frac{1}{1 + \frac{4}{\Gamma^2} (E - E_r)^2} = \frac{\Gamma^2/4}{\frac{\Gamma^2}{4} + (E - E_r)^2} \quad (7.2.67)$$

$$\sigma = 4\pi\hbar \frac{\sin^2 \delta_0}{p^2} = \frac{\pi\hbar^2}{p^2} \frac{\Gamma^2}{\frac{\Gamma^2}{4} + (E - E_r)^2} \quad (7.2.68)$$

Ezt nevezik Breit-Wigner rezonanciának.

Meg lehet mutatni, hogy ha kezdetben olyan állapotot veszek, amely lokalizált  $r < R$ -re, akkor mivel ez nem energia-sajátállapot, időben elfejlődik.

$$\int d\Omega \int_0^R |\Psi|^2 r^2 dR \sim e^{-\frac{\Gamma}{\hbar} t} \quad (7.2.69)$$

Ezek alapján azt mondjuk, hogy  $\Gamma/\hbar$  a bomlási állandó, ennek reciproka pedig az élettartam.

### 7.2.2. Born-közelítés

Előfordul, hogy a parciális hullámkifejtés nem működik, tipikusan akkor, amikor az energia nem elég kicsi, vagy a potenciál nem véges.

A potenciállal még lehet valamit kezdeni például levágjuk egy exponenciális taggal. Ezzel kiszámítjuk a hatáskeresztmetszetet és a legvégén csinálunk egy limeszt az exponenciálisban.

A Schrödinger-egyenletet már számos alkalommal átrendeztük, most is tegyünk egy próbát:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V\Psi = E\Psi \quad (7.2.70)$$

Rendezzük át az egyenletet a következőképpen:

$$(\Delta + k^2)\Psi = Q \quad Q = \frac{2m}{\hbar^2}V\Psi \quad (7.2.71)$$

Egy pillanatra felejtsük el, hogy a  $Q$  függ a  $\Psi$ -től és akkor amit látunk az egy Helmholtz-egyenlet. Ezt a szokásos Green-függvénnyel oldjuk meg:

$$(\Delta + k^2)G(\mathbf{x}) = \delta^{(3)}(\mathbf{x}) \quad (7.2.72)$$

Ezzel:

$$\Psi(\mathbf{x}) = \int d^3x_0 G(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)Q(\mathbf{x}_0) \quad (7.2.73)$$

Az általános megoldás a homogén egyenlet megoldása plusz ez:

$$\Psi(\mathbf{x}) = \Psi_0(\mathbf{x}) + \int d^3x_0 G(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)Q(\mathbf{x}_0) \quad (7.2.74)$$

ahol  $\Psi_0(\mathbf{x})$  a homogén egyenlet általános megoldása, ami meg pont a szabad Schrödinger-egyenlet megoldása. A Green-függvény elektrodinamikából ismerős:

$$G(\mathbf{x}) = -\frac{e^{ikr}}{r} \quad (7.2.75)$$

Ezt behelyettesítjük:

$$\Psi(\mathbf{x}) = \Psi_0(\mathbf{x}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x_0 \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0|} V(\mathbf{x}_0)\Psi(\mathbf{x}_0) \quad (7.2.76)$$

Ez sajnos nem megoldás, mert a jobb oldalon is szerepel a  $\Psi$ , de mégis nagyon hasznos, mert eleve olyan alakban van, hogy automatikusan tudni fogja azt, hogy van egy bejövő részecskenyalábunk, ami síkhullám és van egy gömbhullám alakú szórt hullámunk.

Ha azt mondjuk, hogy a potenciál kicsi, akkor a második tagot alig változtatja, lehet iteratíván okoskodni (formálisan):

$$\Psi_1 = \Psi_0 + \int gV\Psi_0 \quad (7.2.77)$$

ahol  $g = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0|}$ , a propagátor.

$$\Psi_2 = \Psi_0 + \int gV\Psi_1 = \Psi_0 \int gV\Psi_0 + \int \int gVgV\Psi_0 \quad (7.2.78)$$

Itt a szorzásokat mátrixértelenben kell elvégezni.

Az  $n$ -dik esetben:

$$\Psi_n = \Psi_0 + \int gV\Psi_0 + \dots + \underbrace{\int \int \int \dots \int}_{n} (gV)^n \Psi_0 \quad (7.2.79)$$

Nem fogunk elmenni magasabb rendekig, az első Born-közelítés a (7.2.76) egyenlet. Mi lesz a hatáskeresztmetszet?

Tegyük fel, hogy a potenciál véges, azaz az integrál csak  $x_0 \ll 1$  függvénye. Ekkor el tudjuk végezni a szokásos sorfejtéseket:

$$|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0| \approx \sqrt{\mathbf{x}^2 - 2\mathbf{x}\mathbf{x}_0} \approx |\mathbf{x}| - \frac{\mathbf{x}\mathbf{x}_0}{|\mathbf{x}|} \quad (7.2.80)$$

Ezzel az exponens:

$$\frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|} \approx \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}_0} \quad \mathbf{k} = \frac{k\mathbf{x}}{r} \quad (7.2.81)$$

Amint már említettük a  $\Psi_0$  a szabad Schrödinger-egyenlet megoldásai:

$$\Psi_0 = Ae^{ikz} = Ae^{i\mathbf{k}'\mathbf{x}_0} \quad \mathbf{k}' = k\mathbf{e}_z \quad (7.2.82)$$

$$\Psi(\mathbf{x}) = A \left( e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \underbrace{\int d^3x_0 e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\mathbf{x}_0} V(\mathbf{x}_0)}_{\theta, \varphi} \right) \quad (7.2.83)$$

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x_0 e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\mathbf{x}_0} V(\mathbf{x}_0) \quad (7.2.84)$$

Egy kicsit egyszerűbb alakra lehet ezt még hozni. Nézzük meg, hogy mi történik, ha a potenciál gömbszimmetrikus! Erre érdemes bevezetni egy új jelölést:  $\kappa = k' - k$ , ezt le is rajzolhatjuk (l. ???. ábra).

$$|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'| = k \quad \kappa = k \sin \frac{\theta}{2} \quad (7.2.85)$$

A  $-\kappa$  az majdnem az impulzusátadás egy  $\hbar$  erejéig.

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x_0 e^{i\kappa\mathbf{x}_0} V(r_0) \quad (7.2.86)$$

Az integrál polárkoordinátákban érdemes kiszámolni és úgy érdemes megválasztani  $z$  tengely irányát, hogy az  $\kappa$  irányába mutasson. Ekkor  $\kappa\mathbf{x} = \kappa r_0 \cos \theta_0$ .

Ezzel már el lehet végezni az integrált:

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty dr r_0^2 \int_{-1}^1 d(\cos \theta) V(r_0) e^{i\kappa r_0 \cos \theta_0} \quad (7.2.87)$$

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\kappa\hbar^2} \int_0^\infty dr_0 V(r_0) \sin \kappa r_0 \quad (7.2.88)$$

Két fontos példát nézünk meg:

- Yukawa-potenciál

$$V(r) = \frac{\beta e^{-\mu r}}{r} \quad (7.2.89)$$

$$f(\theta) = -\frac{2m\beta}{\hbar^2(\mu^2 - \kappa^2)} \quad (7.2.90)$$

- Coulomb-szórás:  $\beta = q_1 q_2$  és  $\mu \rightarrow 0$

$$f(\theta) = -\frac{2mq_1 q_2}{\hbar^2 \kappa^2} = \frac{2mq_1 q_2}{4\hbar^2 k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \quad (7.2.91)$$

A hatáskeresztmetszet:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{m^2 q_1^2 q_2^2}{4\hbar^2 k^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (7.2.92)$$

## 8. Összefonódott állapotok

### 8.1. Bell-egyenlőtlenségek

Felmerül az emberben a gyanú, hogy lehetséges-e az, hogy a kvantummechanika nem egy teljes leírása a valóságnak, hanem van esetleg egy alapvetőbb elmélet, amely teljesen pontosan megjósolna minden fizikát.

Einstein egyik leghíresebb képviselője volt ennek a gondolatnak, amely 1935-ben egy cikkben teljesezett ki, ez a híres Einstein-Podolsky-Rosen paradoxon. Itt nem az eredeti cikk gondolatmenetét közöljük, hanem egy kicsit módosított változatát, amely Borntól származik.

Arról van szó, hogy vegyünk egy nulla spinű részecskét, például egy  $\pi^0$  semleges piont, amely kezdetben nyugalomban van (teljes impulzusmomentuma nulla) és elbomlik kettő darab feles spinű részecskére, például egy elektron-pozitron párra. Ha jó sokat várunk, akkor ez a két részecske egymástól jó messzire elmegy. Továbbra is teljesül, hogy ha ezek nem hatnak kölcsön senkivel, akkor a teljes impulzusmomentumuk nulla.

Ha az elsőnek megmértem a spinjét, például  $z$  irányban, akkor  $+$  vagy  $-\hbar/2$ -t fogok mérni. Nem tudom mi lesz az eredmény, de az biztos, hogy ezek után, ha a másikat megmértem, akkor előre tudom, hogy mi lesz az eredmény, hisz a teljes impulzusmomentum az nulla.

De ugyanezt csinálhatnám az  $x$ -tengely mentén is.

Honnan tudnak ezek egymásról? Ha az egyiket megmértem honnan tudja a másik, hogy én a társát megértem, vagy nem mértem meg? Ez volt a nagy kérdés. A kvantummechanika nyelvén erre egyszerű a válasz.

Kezdetben van egy nulla spinű részecském, egy  $s_1$  meg egy  $s_2$  spinem, ebből jön össze a teljes impulzusmomentumuk, ami nulla. Fel tudjuk írni a hullámfüggvényét a rendszernek, két, feles spinű részecske összege:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (8.1.1)$$

A kvantummechanika azt mondja, hogy ha csinálók egy mérést valamelyik részecskén, akkor az a teljes állapotot meg fogja változtatni, innen fogja tudni a másik részecske, hogy mit kell neki csinálni. Az ilyen állapotokat, amelyek nem írhatók fel szorzat alakban nevezzük összefonódott állapotoknak.

Igazából, ami történik, hogy korreláció lesz a két oldalon lévő mérések között. De ez nem jelenti azt, hogy bármiféle információ ment volna át. Ennek egy fontos oka, hogy magát a hullámfüggvényt nem lehet megmérni. A hullámfüggvény egyes vetületeit meg tudjuk mérni, de magát a teljes függvényt nem. Ha lenne ilyen mérés, akkor persze tudnék információt közölni, mert látnám rajta, hogy történt-e mérés vagy sem.

Felmerül az a gondolat, hogy itt igazából nem is történt semmi furcsaság, mert mi van, ha már a bomlásnál eldőlt, hogy kinek mi lesz a spinje? Egyszerűen csak azt a rejtett paramétert nem ismerjük, ami ezt meghatározta. Ez volt a cikk konklúziója.

Ha feltesszük, hogy van valamilyen rejtett paraméter, ami mindent pontosan megjósol, akkor fel kellene állniuk bizonyos egyenlőtlenségeknek, amelyeket a kvantummechanika nem tud.

Jelöljük az összes lokális rejtett paramétert  $\lambda$ -val. Ha ezt az értéket ismernénk, akkor minden mérhető fizikai mennyiség értéke jól meghatározott lenne:  $A(\lambda)$ . De mivel nem ismerjük ezt az értéket, ezért azt valamilyen valószínűségeloszlásból "húzzuk". Úgy kell erre gondolni, mint valamilyen statisztikus fizikai rendszerre.

Világos, hogy ennek a  $\lambda$ -nak már a bomlás előtt ki kellett választódnia.

Legyen  $\hbar/2S(\mathbf{a}, \lambda)$  a spin vetülete az  $\mathbf{a}$  irányra.  $S(\mathbf{a}, \lambda) = \pm 1$ , vagyis  $S(\mathbf{a}, \lambda)^2 = 1$ . Mi a várható értéke annak, hogy az egyik oldalon megmértem egy  $\mathbf{a}$  irányba a spint, a másik oldalon egy  $\mathbf{b}$  irányba és a kettőt összeszorozom. Ha van egy ilyen rejtett paraméteres elméletem, akkor ez nem lesz más, mint:

$$\langle (s_1 \mathbf{a})(s_2 \mathbf{b}) \rangle = -\frac{\hbar^2}{4} \int d\lambda \rho(\lambda) S(\mathbf{b}, \lambda) S(\mathbf{a}, \lambda) \quad (8.1.2)$$

azaz

$$\langle (s_1 \mathbf{a})(s_2 \mathbf{b}) \rangle - \langle (s_1 \mathbf{a})(s_2 \mathbf{c}) \rangle = -\frac{\hbar^2}{4} \int d\lambda \rho(\lambda) [S(\mathbf{a}, \lambda) S(\mathbf{b}, \lambda) - S(\mathbf{a}, \lambda) S(\mathbf{c}, \lambda)] = \quad (8.1.3)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{4} \int d\lambda \rho(\lambda) S(\mathbf{a}, \lambda) S(\mathbf{b}, \lambda) [1 - S(\mathbf{b}, \lambda) S(\mathbf{c}, \lambda)] \quad (8.1.4)$$

Kihasználjuk azt, az analízisből jól ismert tételt, mi szerint:

$$\left| \int f(x) dx \right| \leq \int |f(x)| dx \quad (8.1.5)$$

A bal oldalnak vesszük az abszolút értékét:

$$|\langle (s_1 \mathbf{a})(s_2 \mathbf{b}) \rangle - \langle (s_1 \mathbf{a})(s_2 \mathbf{c}) \rangle| \leq \frac{\hbar^2}{4} \int d\lambda \rho(\lambda) [1 - S(\mathbf{b}, \lambda) S(\mathbf{c}, \lambda)] \quad (8.1.6)$$

Innen a Bell-egyenlőtlenségek:

$$|\langle (s_1 \mathbf{a})(s_2 \mathbf{b}) \rangle - \langle (s_1 \mathbf{a})(s_2 \mathbf{c}) \rangle| \leq \frac{\hbar^2}{4} + \langle (s_1 \mathbf{b})(s_1 \mathbf{c}) \rangle \quad (8.1.7)$$

Kieset belőle a  $\lambda$  függés. Mit mond erre a kvantummechanika?

Ha a spinek mérése visszavezethető  $\lambda$ -ra, ennek bármilyen lokális rejtett paraméteres elméletre teljesülni kell.

$$(s_1 \mathbf{a})(s_2 \mathbf{b}) = -\frac{\hbar^2}{4}(\mathbf{a}, \mathbf{b}) \quad (8.1.8)$$

Legyenek ezek az irányok a következők:  $\mathbf{a}$  merőleges  $\mathbf{a}$ -re és  $\mathbf{c} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{a} + \mathbf{b})$ .

A bal oldal értéke  $\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar^2}{4}$ , jobb oldal értéke pedig  $\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar^2}{4}$ .

Ebben esetben sérül az egyenlőség.

Ma már ott tart a technika, hogy kísérletileg tudjuk ellenőrizni polarizált fotonokkal és tényleg sérül. A kvantummechanika kísérleti eredményei nem konzisztensek a lokális rejtett paraméterek elméletével.

## 8.2. Kvantum-számítógépek

A klasszikus számítógépek alapegysége az 1 bit, amely lehet 0 vagy 1. Ennek az analógiájára bevezették a qbit-et, ami egy két állapotú rendszer, ami azt jelenti, hogy kettő dimenziós Hilbert-tér írja le. Van benne egy olyan bázis, hogy ezt a két állapotot lehet 0-val és 1-gyel jellemezni. Az általános állapot:  $\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$ , úgy, hogy  $\alpha^2 + \beta^2 = 1$ . Ezen kívül az egészben még lehet egy tetszőleges fázis, aminek nincsen semmiféle fizikai jelentése. Ha ezt a fázist eltávolítjuk, akkor arra jutunk, hogy 2 valós paraméterünk van.

Tehát 1 qbit-nak megfelel egy 2 dimenziós Hilbert-tér,  $n$  qbit-nek egy  $2^n$  dimenziós Hilbert-tér felel meg. A bázisok úgy mennek, hogy mindenki nullától mindenki egyig mennek, ez pontosan  $2^n$  darab bázis.

Szeretnénk, hogy változzanak a qbit-ek, ehhez az időfüggő Schrödinger-egyenlet kell, valamilyen  $\hat{H}$  Hamilton-operátorral. Az időfejlődést egy unitér operátor hordozza:  $\hat{U} = e^{-i/\hbar \hat{H}t}$ , ezeket nevezzük kvantumkapuknak.

Például egy darab qbit esetén ilyen kvantum kapu a

$$\hat{P}(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{pmatrix} \quad \hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (8.2.1)$$

Ezek egyszerű unitér mátrixok, de nincs minden klasszikus kapunak kvantumos megfelelője. Nincsen például másolás, mivel ha ez lenne, akkor véges sok lépésből ki lehetne mérni a hullámfüggvény alakját.

A kvantumszámítógép definíciója a következő:

- $n$  darab qbit-ből áll és be tudjuk őket állítani a  $|0\rangle$  állapotba
- meg tudjuk mérni a qbit-ek állapotát
- vannak kvantum kapuk, melyek unitér transzformációk
- nincs semmilyen más kölcsönhatás

Ez az egész kvantumszámítógép nem túl sok problémára használható. Egy ilyen algoritmus egy függvény periódusának meghatározása, ha tudjuk, hogy valahol  $N/2$  és  $N$  között van. Klasszikus megoldás az lenne, hogy végigmegyünk az egészen  $\sqrt{N}$  lépéssel.

Ehelyett vegyük észre, hogy igazából csak  $\log N$  információ ment be, ennyi kell  $N$  megadásához. Ehhez képest exponenciálisan drága a klasszikus eljárás. A kvantumszámítógépekre írtak egy algoritmust, amely ezt  $\log N$  lépés alatt megcsinálja.

Legyen két  $n$  darab qbit-ünk.  $n$  darab  $x$  regiszter és  $n$  darab  $y$  regiszter. Mindkettőjük egy  $n$  dimenziós Hilbert-térben él és  $n = 2 \log N$ . Az első lépés, hogy lenullázzuk az  $x$  és  $y$  regisztert.

Következő lépés, hogy hattassuk a  $\hat{H}$  operációt minden  $x$ -re. Ebből az lesz, hogy

$$\hat{H}(|0\rangle |0\rangle \dots |0\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}((|0\rangle + |1\rangle)(|0\rangle + |1\rangle) + \dots) \quad (8.2.2)$$

Az összes szám bináris alakja megjelenik nullától  $2^n - 1$ -ig. Ezt felírhatjuk úgy, hogy

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_x^{2^n-1} |x\rangle \quad (8.2.3)$$

Csináltam egy olyan szuperpozíciót, amiben minden egész szám benne nullától  $2^n - 1$ -ig. Kicsit átjelöljük:

$$\hat{H} |0\rangle |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{w}} \sum_x^{w-1} |x\rangle |0\rangle \quad (8.2.4)$$

ahol  $w = 2^n$ .

Most keresünk egy unitér operációt, ami azt tudja, hogy  $\hat{U}_f(x) |0\rangle = |x\rangle |f(x)\rangle$ . Ez nem olyan, mint a másolás, csak a bázisvektorokra kell teljesülnie. Ezt egyszerű függvényekre meg lehet valósítani. Most ezzel hatunk az állapotunkra:

$$\hat{U}_f \hat{H} |0\rangle |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{w}} \sum_x^{w-1} |x\rangle |f(x)\rangle \quad (8.2.5)$$

A harmadik lépés után ott tartunk, hogy nullától  $w$ -ig kiértékeljük egyszerre az összes számot. Mivel a periódust akarjuk megkeresni, ezért csinálunk egy mérést a második regisztereken. Vagyis megmérjük  $f(x)$  értékét és ennek az eredménye valami  $u$  lesz. A szummából kiválasztódik az az állapot, hogy

$$\frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{j=0}^{M-1} |du + jr\rangle |u\rangle \quad (8.2.6)$$

$M$  nagyjából  $w/r$ , ha  $r$  a periódus. Tegyük fel, hogy pont egész számú periódus fért bele a szummába. Ez nyilván nem teljesül általában, de az algoritmus fejleszthető.

A következő lépés, csinálunk egy Fourier transzformációt az  $x$  regiszteren. Ez egy unitér transzformáció és technikailag fel is építhető:

$$\hat{U}_{FT} |x\rangle = \frac{1}{\sqrt{w}} \sum_{k=0}^{w-1} e^{i\frac{2\pi}{w}kx} |k\rangle \quad (8.2.7)$$

Hattassuk ezt az állapotunkra:

$$\hat{U}_{FT} \frac{1}{\sqrt{\frac{w}{r}}} \sum_{j=0}^{\frac{w}{r}-1} |du + jr\rangle |u\rangle = \text{const} \sum_k \bar{f}(k) |k\rangle \quad (8.2.8)$$



Az együtthatók csak akkor nem nullák (és akkor is egyek), ha  $k = \frac{w}{r}$  szorozva valami egész számmal. Ez a frekvenciája ennek a jelnek.

Utolsó lépés egy mérés, megkérjük  $k$  értékét. Csak egy olyan  $k$ -t kaphatunk, ahol  $f$  nem nulla, tehát olyan  $k$ -t fogunk kapni, ami valami egész szám szorozva  $w/r$ -rel. Nekünk ebből  $r$ -re van szükségünk. Mivel mindenki egész szám könnyű látni, hogy tipikusan ebből megmondható  $r$ .

Ha nem tudjuk egyértelműen megmondani  $r$ -t akkor az egészet meg kell ismételni. Meg lehet mutatni, hogy logaritmikusan sokszor kell csak megismételni az eljárást, ez után egyhez tetszőlegesen közeli valószínűséggel megmondhatjuk a függvény periódusát.

Ennek van egy nagyon fontos alkalmazása, mégpedig a faktorizáció. Legyen  $N$  egy nagy szám és  $f(x) = a^x \bmod N$ . Meg lehet mutatni, hogy tipikusan  $f$  periódusa tipikus  $a$ -ra páros és  $a^{r/2} \pm 1$ -nek van közös osztója  $N$ -nel. Ez azért jó, mert közös osztót keresni sokkal gyorsabb, mint osztót keresni, ez már megy polinomiális idő alatt.