# 4. A FIZIKAI MENNYISÉGEKET REPREZENTÁLÓ OPERÁTOROK SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI

Az előző fejezetben láttuk, hogy a fizikai mennyiségek nem a klasszikus fizikában megszokott folytonos, differenciálható függvényekkel reprezentálhatók, hanem lineáris hermitikus operátorokkal. Az $O$ fizikai mennyiség (mérhető) lehetséges értékei a neki megfelelő operátorra vonatkozó $O\varphi_n = k_n\varphi_n$ sajátérték egyenletből határozhatók meg. Itt a $k_n$ sajátértékek jelentik az illető fizikai mennyiség lehetséges értékeit, a $\varphi_n$ sajátfüggvények pedig a fizikai mennyiség mérésekor játszanak fontos szerepet.

A továbbiakban megismerkedünk néhány fizikai mennyiséget reprezentáló operátorral és megoldjuk sajátérték egyenletüket. Minthogy a legtöbb fizikai mennyiség koordinátából és impulzusból tevődik össze, először ezekkel ismerkedünk meg részletesebben. Ezek után a belőlük leszármaztatható mennyiségek közül az impulzusmomentummal, majd az energiával foglalkoznunk.

Amint az korábban szerepelt, az $x$ koordináta operátort az $x$ koordinátával való szorzással reprezentáljuk, míg a $p_x$ impulzus operátora az $x-$szerinti deriválással kapcsolatos:

$$x \to x\cdot\,; \quad p_x \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\,.$$

Ezt a reprezentációt *koordináta* (vagy x-) *reprezentáció*nak hívjuk. A koordináta és impulzus operátorának természetesen elképzelhető másféle realizációja is, csak a Heisenberg-féle alapvető

$$[p_x, x] = \frac{\hbar}{i}$$

felcserélési törvénynek kell teljesülnie. Így pl. használatos az ún. *impulzus* (vagy p-) *reprezentáció,* amelyben

$$p_x \to p_x\cdot\,; \quad x \to -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p_x}\,.$$

A továbbiakban az $x-$reprezentációban dolgozunk.

## 4.1. A KOORDINÁTA OPERÁTOR SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI (DISZTRIBÚCIÓK. FOLYTONOS SAJÁTÉRTÉK SPEKTRUM ESETE)

Felírjuk a sajátérték egyenletet:

$$x\varphi_a(x) = a\varphi_a(x).$$

Mivel a részecske az egydimenziós tér $(a_1, a_2)$ részében bárhol előfordulhat, az $a$ sajátérték az $a_1 \leq a \leq a_2$ tartományban tetszőleges értéket vehet fel. A fenti sajátérték egyenlet tehát *folytonos spektrum*mal rendelkezik. Ugyanakkor az is kitűnik, hogy a $\varphi_a(x)$ sajátfüggvénynek az $x = a$ hely kivételével zérusnak kell lennie, ugyanis

$$(x - a)\varphi_a(x) = 0.$$

Látjuk ebből, hogy a koordináta operátornak nincs reguláris sajátfüggvénye, mivel $\varphi_a$ nem folytonos. Ahhoz, hogy a folytonos sajátértékspektrummal rendelkező fizikai mennyiségek sajátfüggvényeit értelmezzük, a függvényfogalom általánosításaként Dirac nyomán bevezetjük a *disztribúciókat* (amelyek magukba foglalják a reguláris függvényeket és ezek konvergens sorozatainak *határértékeit* is). A koordináta operátor sajátfüggvénye disztribúciókkal kapcsolatos.

Egy ilyen disztribúciót Dirac nyomán a következőképpen definiálunk:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\psi(x)\,dx = \psi(0),$$

ahol $\psi(x)$ egy tetszőleges függvény, az integrációs tartomány véges is lehet, csak az $x = 0$ környékét kell, hogy tartalmazza. Speciálisan $\psi \equiv 1$-et választva, kapjuk a $\delta-$disztribúció (köznapi nevén: $\delta-$függvény) normalizációs tulajdonságát:

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

$\delta(x)$, jóllehet nem reguláris függvény, előállítható reguláris függvények határértékeként:

$$\delta(x) = \lim_{b\to 0} \delta_b(x), \quad \text{vagy :} \quad \delta(x) = \lim_{t\to\infty} \delta_t(x),$$

ahol

$$\delta_b(x) = \frac{1}{2b\sqrt{\pi}} e^{-x^2/4b^2}, \quad \text{vagy :} \quad \delta_t(x) = \frac{\sin^2 xt}{\pi x^2 t}$$

normált reguláris függvények (amelyeknek másféle választása is elképzelhető).

A $\delta-$függvény egy integrális előállítása:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\,dk.$$

A disztribúciók (definícióból következő) további néhány tulajdonsága:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - a)\psi(x)\,dx = \psi(a),$$

$$\delta(ax) = |a|^{-1}\delta(x), \quad a > 0,$$

$$\delta(-x) = \delta(x),$$

$$\delta(x - a) = \begin{cases} 0, & \text{ha} \quad a \neq x, \\ \infty, & \text{ha} \quad a = x, \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x)\psi(x)\,dx = -\psi'(0).$$

*A koordináta sajátfüggvény* ezek után a

$$\varphi_a(x) = \delta(x-a) \tag{26}$$

alakban adható meg. Az, hogy a koordináta sajátállapot maga nem reguláris függvény (azok határértékeként viszont elő állítható), pontosan megfelel annak a ténynek, hogy a természetben nem létezhet abszolút élesen meghatározott koordináta érték (ld. határozatlansági reláció).

*Normáltsági összefüggés:*

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_a^*(x)\varphi_{a'}(x)\,dx = \delta(a-a'), \tag{27}$$

amely a $\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm}$ ortonormáltsági reláció folytonos spektrum esetre vonatkozó megfelelője.

*Teljességi összefüggés:*

$$\int_{a_1}^{a_2} \varphi_a(x)\varphi_a^*(x')\,da = \delta(x-x'), \tag{28a}$$

amelyet (21) folytonos sajátértékspektrum esetére való általánosításaként kaptunk.

(28a)-ból láthatjuk, hogy a folytonos sajátértékspektrumhoz tartozó sajátfüggvények nem normálhatók. Ez nem meglepetés, hiszen már tudjuk róluk, hogy nem tartoznak a reguláris függvények körébe. Ezért a mérési statisztikának a diszkrét spektrum esetére vonatkozó (23) alatti összefüggését is általánosítani kell a következő módon.

A teljesség azt jelenti, hogy egy normált $\psi(x)$ állapotfüggvény kifejthető a koordináta sajátfüggvények teljes rendszere szerint a következőképpen:

$$\psi(x) = \int_{a_1}^{a_2} c(a)\varphi_a(x)\,da,$$

ahol a

$$c(a) \equiv \langle\varphi_a|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_a^*(x')\psi(x')\,dx' \quad [= \psi(a)\,!]$$

kifejtési együtthatókra fennáll a normáltsági feltételből következő

$$1 = \langle\psi|\psi\rangle = \int_{a_1}^{a_2} |c(a)|^2\,da \tag{28b}$$

egyenlet, amely (22) folytonos spektrumra való általánosítása. Ez az analógia lehetővé teszi, hogy posztuláljuk: *annak valószínűsége, hogy a $\psi$ állapotban levő rendszeren az $x-$koordinátára vonatkozó mérési eredmény az $(a_1, a_2)$ sajátérték spektrum $a' \le a \le a''$ szakaszába essék:*

$$W(a', a'') = \int_{a'}^{a''} |c(a)|^2\,da = \int_{a'}^{a''} |\langle\varphi_a|\psi\rangle|^2\,da. \tag{29}$$

Behelyettesítve a koordináta sajátfüggvény kifejezését, kapjuk:

$$W(a', a'') = \int_{a'}^{a''} |\psi(x)|^2\,dx,$$

ami az állapotfüggvény jól ismert, térbeli (megtalálási) valószínűségi értelmezésével teljes összhangban van.

*Hermiticitás:* Elegendő egy dimenzióra bizonyítani ($f, g \in \mathcal{D}_x = \mathcal{L}_2$):

$$\langle f|xg\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f^* x g = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, (xf)^* g = \langle xf|g\rangle$$

## 4.2. AZ IMPULZUS OPERÁTOR SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI

Az impulzus (lendület) operátor sajátérték egyenletét részben már tárgyaltuk az előző fejezet 3.1. pontjában. Koordináta reprezentációban a sajátérték egyenlet:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\varphi_{p_x}(x) = p_x \varphi_{p_x}(x)$$

alakú, ahol $p_x$ a keresett sajátérték, $\varphi_{p_x}(x)$ a keresett sajátfüggvény. A megoldás

$$\varphi_{p_x}(x) = Ae^{ip_x x/\hbar}$$

alakban írható, a $p_x$ impulzus sajátértékek pedig a $-\infty \leq p_x \leq \infty$ tartományon beül tetszőlegesen (folytonosan) változhatnak. Az $A$ határozatlan normálási állandó az

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{p_x}(x)\varphi^*_{p_x}(x')\, dp_x = \delta(x - x')$$

*teljességi összefüggés* megkövetelésével rögzíthető $A = \sqrt{1/h}$ értékre. Az egydimenziós mozgás *impulzus sajátfüggvény*e tehát

$$\varphi_{p_x}(x) = \sqrt{\frac{1}{h}} e^{ip_x x/\hbar}, \tag{30a}$$

*sajátérték*e pedig $p_x$ , amely folytonosan a $-\infty \leq p_x \leq \infty$ intervallumba eshet.

Az impulzus sajátfüggvényekre (hasonlóan a koordináta sajátfüggvényekhez) a $\delta-$*normálás* érvényes:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*_{p_x}(x)\varphi_{p'_x}(x)\, dx = \delta(p_x - p'_x), \tag{30b}$$

azaz az impulzus sajátfüggvény sem tartozik a reguláris függvények körébe (mivel az abszolút pontos impulzus [saját]érték a klasszikus fizikából átvett olyan szemléletes fogalmi absztrakció, amely a természetben a határozatlansági elv miatt nem létezik).

*Mérési statisztika:* az impulzuseloszlást jellemző

$$c(p_x) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*_{p_x}(x')\psi(x')\, dx' \equiv \langle \varphi_{p_x}|\psi\rangle$$

spektrális kifejtési együtthatókra fennáll a

$$\int_{-\infty}^{\infty} |c(p_x)|^2\, dp_x = 1 = \langle \psi|\psi\rangle$$

normáltsági feltétel.

Annak valószínűsége, hogy a ($p_x-$impulzusra vonatkozó) mérési eredmény a sajátérték spektrum egy $p' \leq p_x \leq p''$ szakaszába essék:

$$W(p', p'') = \int_{p'}^{p''} |c(p_x)|^2\, dp_x. \tag{31}$$

*Hermiticitás:* Szintén elegendő egy dimenzióra bizonyítani ($f, g \in \mathcal{D}_{p_x} = \mathcal{L}_2$):

$$\langle f|p_x g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f^* \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} g =$$

$$= \frac{\hbar}{i}\Big[f^*(x)g(x)\Big]_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} f(x)\right)^* g(x) = 0 + \langle p_x f|g\rangle$$

Megjegyzendő, hogy általában $p_x \neq p_x^+$, mivel $\mathcal{D}_{p_x^+} \supset \mathcal{D}_{p_x}$, amint azt az előző fejezetben részletesen diszkutáltuk. Az impulzus operátora tehát nem önadjungált, viszont hermitikus (az $\mathcal{L}_2$ függvények terén).

## 4.3. AZ IMPULZUSMOMENTUM OPERÁTOR SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI

Az impulzusmomentum (perdület, impulzusnyomaték) $\mathbf{L}$ operátora kifejezhető a koordináta ($\mathbf{r}$) és az impulzus ($\mathbf{p}$) operátorok vektoriális szorzataként

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{bmatrix} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \begin{bmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{bmatrix}.$$

### 4.3.1. AZ IMPULZUSMOMENTUM OPERÁTOR KOMPONENSEIRE VONATKOZÓ FELCSERÉLÉSI RELÁCIÓK.

Könnyen belátható a (24)–es felcserélési relációk alkalmazásával, hogy az impulzusmomentum operátor komponensei között a következő felcserélési relációk érvényesek

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \tag{32a}$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x, \tag{32b}$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y. \tag{32c}$$

A határozatlansági összefüggés értelmében ezen felcserélési relációk azt jelentik, hogy az impulzusmomentumnak csak az egyik komponense lehet teljesen meghatározott, míg a másik két komponens határozatlan, elmosódott (szórással rendelkező) értékeket vesz fel mérések esetén. Az elmosódottság mértéke éppen a harmadik komponens nagyságával áll összefüggésben.

A fenti felcserélési relációk vektoriális alakban is összefoglalhatók:

$$\mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\hbar \mathbf{L}. \tag{32d}$$

Az impulzusmomentum *négyzete* viszont mindegyik komponenssel felcserélhető:

$$[\mathbf{L}^2, L_z] = [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_z] = 0, \tag{33}$$

amint az ellenőrízhető egy kis algebrai munkával. Ez utóbbi felcserélési reláció tehát azt jelenti, hogy az impulzusmomentum nagysága és egyik komponense egyidejűleg mérhető (=vehet fel határozott értéket) és közös sajátfüggvény rendszerrel rendelkeznek.

### 4.3.2. AZ IMPULZUSMOMENTUM $z-$KOMPONENSÉNEK OPERÁTORA ÉS SAJÁTÉRTÉKEI.

Az impulzusmomentum $z-$komponensének operátora koordináta reprezentációban az előzőek szerint tehát

$$L_z = xp_y - yp_x = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).$$

Áttérve az $(x, y, z)$ Descartes koordináta rendszerből az $(r, \vartheta, \varphi)$ gömbi polár koordináta rendszerbe

$$x = r\sin\vartheta\cos\varphi,$$

$$y = r\sin\vartheta\sin\varphi,$$

$$z = r\cos\vartheta,$$

és figyelembe véve a következő összefüggést

$$\frac{df(\mathbf{r})}{d\varphi} = \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\varphi} + \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\varphi} + \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\varphi}$$

$$= \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial x}(-y) + \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial y}x + 0 = \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)f,$$

$L_z-$re az alábbi egyszerű matematikai alakot nyerjük:

$$L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

Az

$$L_z\psi = k\psi$$

sajátérték probléma tehát a $\psi'(\varphi) = \frac{i}{\hbar}k\psi(\varphi)$ differenciálegyenlet megoldását igényli. A megoldás $\psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}k\varphi}$ alakú, ahol az $A$ integrációs állandót a *normálás*i feltételből határozzuk meg:

$$1 = \int_0^{2\pi} |\psi|^2\, d\varphi = |A|^2 2\pi \quad \rightarrow \quad |A| = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Az *egyértékűség* regularitási követelményből megszorítást kapunk a $k$ sajátértékre, ugyanis abból, hogy a $\varphi$ és $\varphi + 2\pi$ helyen vett megoldás ugyanazt az értéket szolgáltassa, azaz $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$ legyen, $\frac{k}{\hbar} = m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$. következik. Ebből megkaptuk az impulzusmomentum $z-$komponensének lehetséges *(saját)értékei*t:

$$k_m = \hbar m, \qquad m = 0, \pm1, \pm2, \ldots, \tag{34}$$

ahol a sajátértékeket elláttuk a kvantumszámra vonatkozó indexszel. Azt kaptuk tehát, hogy az impulzusmomentum $z-$irányú vetülete kvantált, nem vehet fel tetszőlegesen folytonos értékeket, hanem csak $\hbar$, a $2\pi-$vel osztott Planck állandó egész számú többszöröse lehet.

A lehetséges *sajátállapotok*at is az $m$ kvantumszámokkal (az ún. *mágneses, vetület*, vagy *azimutális* kvantumszámokkal) indexelhetjük:

$$\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots. \tag{35}$$

*Hermiticitás:* Könnyen belátható, hogy az $L_z = xp_y - yp_x = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$ operátor a háromdimenziós, négyzetesen integrálható függvények terén hermitikus. Ugyancsak belátható, hogy a $2\pi$ szerint periódikus $f(\varphi) = f(\varphi + 2\pi)$ függvények terén is hermitikus az $L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$ operátor. Mindkét esetben ugyanis az ún. "felületi tagok" eltűnnek.

*Teljesség:*

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \psi_m(\varphi)\psi_m^*(\varphi') = \frac{1}{2\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\varphi-\varphi')} = \delta(\varphi - \varphi').$$

### 4.3.3. AZ IMPULZUSMOMENTUM NÉGYZETÉNEK SAJÁTÉRTÉK PROBLÉMÁJA .

A sajátérték egyenlet a következő

$$\mathbf{L}^2 Y = \Lambda Y$$

Az $\mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ operátort felírhatjuk derékszögű koordináta rendszerben

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 \left[ \left( y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right)^2 + \left( z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \right)^2 + \left( x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \right],$$

vagy polár koordináta rendszerben:

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} + \cot\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right).$$

Az impulzusmomentum ez utóbbi reprezentációjában érdemes dolgozni, mivel ez csak két koordináta változót tartalmaz (az $r$ változó kiesett az átalakítás során). A sajátérték egyenlet ezek után

$$-\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} + \cot\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right) Y(\vartheta,\varphi) = \Lambda Y(\vartheta,\varphi).$$

A reguláris megoldásokat a változókban szeparált alakban érdemes keresni:

$$Y(\vartheta,\varphi) = F(\vartheta)G(\varphi).$$

Behelyettesítés után és $(-\sin^2\vartheta/\hbar^2 Y)-$nal végigszorozva a következő összefüggést kapjuk:

$$\frac{\sin^2\vartheta}{F}\left( \frac{d^2F}{d\vartheta^2} + \cot\vartheta\frac{dF}{d\vartheta} \right) + \frac{\Lambda}{\hbar^2}\sin^2\vartheta = -\frac{1}{G}\frac{d^2G}{d\varphi^2} = \alpha.$$

Minthogy a baloldal csak $\vartheta-$tól függ, a középső rész pedig csak $\varphi-$től, az egyenlőség csak úgy állhat fenn, ha mindkét oldal külön-külön állandó. Ezt az állandót jelöltük $\alpha-$val. A $G-$re vonatkozó meghatározó egyenlet tehát a következő:

$$\frac{d^2G}{d\varphi^2} + \alpha G = 0.$$

Ennek megoldása

$$G = Ae^{i\sqrt{\alpha}\varphi}.$$

Az egyértékűség és normálás miatt $\sqrt{\alpha} = m$ =egész és $A = 1/\sqrt{2\pi}$. ($G$ tehát megegyezik $L_z$ sajátfüggvényével.)

$F$ meghatározására ezek után a következő differenciálegyenlet szolgál:

$$\frac{d^2F}{d\vartheta^2} + \cot\vartheta \frac{dF}{d\vartheta} + \left(\frac{\Lambda}{\hbar^2} - \frac{m^2}{\sin^2\vartheta}\right) F = 0.$$

Mivel az egyenletnek a $\sin\vartheta = 0$ helyen szingularitása van, a megoldást a következő alakban keressük:

$$F = \sin^{|m|}\vartheta \cdot P(\cos\vartheta),$$

ahol $P$ egy polinom. Behelyettesítés és $\sin^{|m|}\vartheta-$val való osztás után, a $\xi = \cos\vartheta$ jelölés bevezetésével kapjuk:

$$(1-\xi^2)\frac{d^2P}{d\xi^2} - 2(|m|+1)\xi\frac{dP}{d\xi} + \left(\frac{\Lambda}{\hbar^2} - |m|(|m|+1)\right) P = 0.$$

Beírva a polinom $P = \sum_{r=0}^{\infty} c_r\xi^r$ hatványsor alakját, a következő kifejezést nyerjük az ismeretlen kifejtési együtthatókra:

$$\sum_{r=0}^{\infty}\left\{(r+2)(r+1)c_{r+2} - \left[(r+|m|)(r+|m|+1) - \frac{\Lambda}{\hbar^2}\right]c_r\right\}\xi^r = 0.$$

Ez az egyenlet $\xi$ tetszőleges értékére csak akkor elégül ki, ha a $P(\xi)$ polinom együtthatói között a

$$c_{r+2} = \frac{(r+|m|)(r+|m|+1) - \Lambda/\hbar^2}{(r+1)(r+2)}c_r$$

rekurzós összefüggés fennáll. Mivel $\xi = \pm 1$ ($\vartheta = 0$ vagy $\pi$) és $|m| = 0$ esetén a $P(\xi)$ polinom egymást követő tagjainak hányadosa megegyezik a divergens $(1/1 + 1/2 + ... + 1/r + ...)$ harmonikus sor megfelelő tagjainak hányadosával ($|m| > 0$ esetén a végtelen sok tagot tartalmazó $P(1)$ sora még divergensebb), a regularitás miatt szükséges az, hogy a $P$ polinom véges fokszámú legyen. Tegyük fel, hogy $t$ az a maximális fokszám, ahol $P$ sora megszakad. Ez akkor valósul meg, ha $c_t \neq 0$, de $c_{t+2} = 0$, azaz

$$\Lambda = \hbar^2(t+|m|)(t+|m|+1).$$

Jelölés: $\ell = t + |m|$. Ezzel az impulzusmomentum négyzetének *sajátértékei*re a következő összefüggést kapjuk:

$$\Lambda = \hbar^2\ell(\ell+1), \qquad \ell = 0, 1, 2, \ldots. \tag{36}$$

A megfelelő *sajátfüggvények*

$$Y_\ell^m(\vartheta,\varphi) = A\sin^{|m|}\vartheta P_\ell^{|m|}(\cos\vartheta)e^{im\varphi} \qquad (|m| \leq \ell) \tag{37}$$

az ún. gömbfüggvények. A $P$ neve: asszociált Legendre polinom. Ezek a függvények gyakorta használatosak, ezért a legtöbb kézikönyvben megtalálhatók. Itt felírjuk belőlük az első néhányat (ld. a megfelelő 15/a alatti illusztrációkat, ahol az $r(\vartheta) = |Y_l^m(\vartheta,\varphi)|^2 = |F(\vartheta)|^2$ függvényeket ábrázoltuk):

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\vartheta, \quad Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta e^{i\varphi};$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\vartheta - 1), \quad Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\vartheta\cos\vartheta\, e^{i\varphi}, \quad Y_2^2 = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\vartheta\, e^{2i\varphi}.$$

Tulajdonságaik közül legfontosabb az *ortonormalitás:*

$$\int_0^\pi \sin\vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi\, Y_\ell^{m*} Y_{\ell'}^{m'} = \delta_{\ell\ell'}\, \delta_{mm'},$$

a *teljesség:*

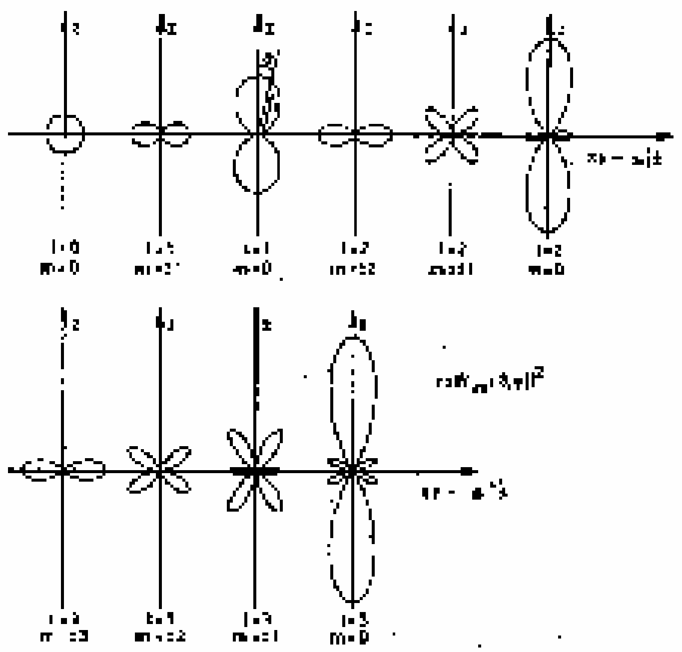
$$\sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{-\ell}^{\ell} Y_\ell^m(\vartheta,\varphi) Y_\ell^m(\vartheta',\varphi')^* = (\sin\vartheta)^{-1}\delta(\vartheta-\vartheta')\delta(\varphi-\varphi'),$$

az ún. *addíciós tétel:*

$$\sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^m(\vartheta,\varphi) Y_\ell^m(\vartheta',\varphi')^* = \frac{2\ell+1}{4\pi} P_\ell(\cos\Theta),$$

ahol $\Theta$ a két $\hat{\mathbf{r}} \equiv (\vartheta,\varphi)$ és $\hat{\mathbf{r}}' \equiv (\vartheta',\varphi')$ irány által bezárt szög, valamint a következő összefüggés:

$$Y_\ell^{-m}(\vartheta,\varphi) = (-1)^m Y_\ell^m(\vartheta,\varphi)^*.$$



15/a ábra- Az első néhány gömbfüggvény abszolút értékének négyzete: $r(\vartheta) = |Y_\ell^m(\vartheta,\varphi)|^2$.

15/a ábra: Az első néhány gömbfüggvény abszolút értékének négyzete: $r(\vartheta) = |Y_\ell^m(\vartheta,\varphi)|^2$.

### 4.3.4. $L_z$ ÉS $L^2$ SAJÁTÉRTÉKEI A CSERERELÁCIÓK FELHASZNÁLÁSÁVAL.

Definiáljuk a *nem*hermitikus

$$L_\pm = L_x \pm i L_y$$

ún. *léptető operátorok*at.

Könnyen ellenőrízhető tulajdonságaik a következők:

$$(L_\pm)^+ = L_\mp, \tag{a}$$

$$[L_z, L_\pm] = \hbar(iL_y \pm L_x) = \pm\hbar L_\pm, \tag{b}$$

$$[L_+, L_-] = -2i[L_x, L_y] = 2\hbar L_z, \tag{c}$$

$$[L^2, L_\pm] = 0, \tag{d}$$

$$L_+L_- = L_x^2 + L_y^2 - i[L_x, L_y] = L_x^2 + L_y^2 + \hbar L_z, \tag{e}$$

és ezért

$$L^2 = L_+L_- - \hbar L_z + L_z^2 = L_-L_+ + \hbar L_z + L_z^2. \tag{f}$$

Írjuk $L_z$ sajátérték problémáját az

$$L_z\psi_m = m\hbar\psi_m$$

alakba ($m-$ről még semmit nem tudunk). Ekkor, (b) miatt

$$L_zL_\pm\psi_m = L_\pm L_z\psi_m \pm \hbar L_\pm\psi_m,$$

amiből következik:

$$L_z(L_\pm\psi_m) = (m\pm 1)\hbar(L_\pm\psi_m),$$

tehát $L_\pm$ eggyel felfelé, ill. lefelé lépteti $L_z$ sajátértékeit !

Írjuk fel továbbá $L^2$ sajátérték problémáját az

$$L^2\mathcal{Y}_\Lambda^m = \hbar^2\Lambda\mathcal{Y}_\Lambda^m$$

próba alakba. ($\Lambda-$ról sem tudunk még semmit, legfeljebb annyit, hogy valós és nemnegatív, $\mathcal{Y}_\Lambda^m$ pedig $L_z$ és $L^2$ közös sajátfüggvénye.)

(d) miatt:

$$L^2(L_\pm\mathcal{Y}_\Lambda^m) = L_\pm L^2\mathcal{Y}_\Lambda^m = \hbar^2\Lambda(L_\pm\mathcal{Y}_\Lambda^m),$$

azaz $L_\pm$ az $L^2$ operátor $\Lambda$ sajátértékét változatlanul hagyja.

További felvilágosítással a $\Lambda$ és $m$ sajátértékekről az $L_\pm\mathcal{Y}_\Lambda^m$ normája szolgál:

$$\langle L_\pm\mathcal{Y}_\Lambda^m | L_\pm\mathcal{Y}_\Lambda^m\rangle = \langle\mathcal{Y}_\Lambda^m | L_\mp L_\pm\mathcal{Y}_\Lambda^m\rangle =$$

$$\left\langle\mathcal{Y}_\Lambda^m | (L^2 - L_z^2 \mp \hbar L_z)\mathcal{Y}_\Lambda^m\right\rangle = \hbar^2[\Lambda - m^2 \mp m] = \hbar^2[\Lambda - m(m\pm 1)] = (Q_{\Lambda m}^\pm)^2 \geq 0,$$

ahol az első egyenlőség (a) miatt, a második (f) miatt igaz. Mármost a norma pozitívitása miatt $m > 0$ esetén

$$\Lambda \geq m(m+1),$$

$m < 0$ esetén pedig

$$\Lambda \geq m(m-1) = (-m)(-m+1),$$

azaz

$$\Lambda \geq |m|(|m|+1),$$

tetszőleges $m$ esetén.

Legyen most $\max m = \ell \geq 0$. Ekkor (f) kihasználásával kapjuk:

$$\hbar^2 \Lambda \mathcal{Y}_\Lambda^\ell = L^2 \mathcal{Y}_\Lambda^\ell = (L_- L_+ + \hbar L_z + L_z^2)\mathcal{Y}_\Lambda^\ell = (0 + \hbar^2 \ell + \hbar^2 \ell^2)\mathcal{Y}_\Lambda^\ell = \hbar^2 \ell(\ell+1)\mathcal{Y}_\Lambda^\ell.$$

Ezért a továbbiakban $\Lambda = \ell(\ell+1)$, ahol $\ell = \max m$ és az egyértelműség miatt indexelhetjül $\ell-$lel is a közös sajátfüggvényt (és a normát).

Az eddigieket összefoglalva:

$$L_\pm \mathcal{Y}_\ell^m = Q_{\ell m}^\pm \mathcal{Y}_\ell^{m\pm 1}, \quad \text{azaz} \quad \mathcal{Y}_\ell^{m\pm 1} = (Q_{\ell m}^\pm)^{-1} L_\pm \mathcal{Y}_\ell^m,$$

ahol

$$\ell(\ell+1) \geq |m|(|m|+1), \quad \text{azaz} \quad |m| \leq \ell \quad \text{és} \quad Q_{\ell m}^\pm = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm 1)}.$$

Tekintsük most a $\max(m) = \ell$ esetet. Ekkor

$$L_+ \mathcal{Y}_\ell^\ell = 0$$

kell legyen, mert nincs $\mathcal{Y}_\ell^{\ell+1}$ állapot. Hasonlóan, legyen $\min(m) = -\ell$. Ekkor

$$L_- \mathcal{Y}_\ell^{-\ell} = 0$$

kell legyen, mivel nem létezik $\mathcal{Y}_\ell^{-\ell-1}$ állapot. Ezért, kiindulva az $\mathcal{Y}_\ell^\ell$ sajátfüggvényből, az $L_-$ operátor segítségével lépésről lépésre előállíthatjuk az $\mathcal{Y}_\ell^{\ell-1}$, $\mathcal{Y}_\ell^{\ell-2}$, stb. sajátfüggvényeket:

$$L_- \mathcal{Y}_\ell^\ell \sim \mathcal{Y}_\ell^{\ell-1}, \quad (L_-)^2 \mathcal{Y}_\ell^\ell \sim \mathcal{Y}_\ell^{\ell-2}, \ldots$$

Mivel $m = \ell, \ell-1, ..., -\ell$, a léptető operátort valamilyen $k$ *egész* számszor alkalmazva jutunk el a $-\ell$ legkisebb vetületkvantumszámú állapothoz, azaz

$$\ell - k = -\ell, \quad k = \text{egész}.$$

Ebből következik: $2\ell = k$, azaz $\ell = k/2$. Tehát $\ell$ csak *egész* (pl. pályaimpulzusmomentum), vagy *félegész* (pl. spin) lehet! Azaz a sajátértékek:

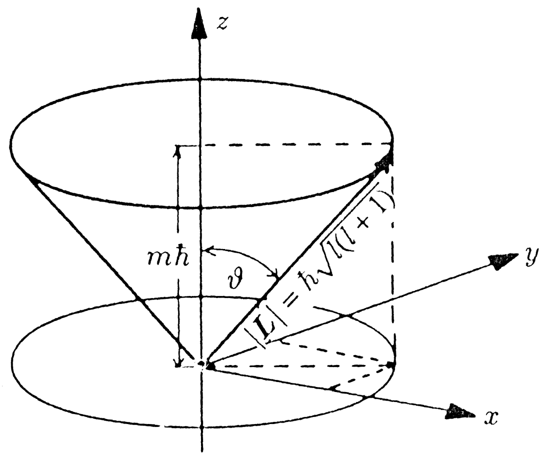
$$\ell = 0, 1, 2, ..., \quad \text{vagy} \quad \ell = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2} ...$$

és

$$m = \ell, \ell-1, \ell-2, ..., -\ell+1, -\ell.$$

### 4.3.5. AZ IMPULZUSMOMENTUM SAJÁTÉRTÉKEINEK ÉRDEKESSÉGEI.

*a)* Az előző alfejezetben korlátot kaptunk $|m|$−re, amely az impulzusmomentum $z-$*komponensének* sajátértékével, $\hbar m-$mel kapcsolatos: $|m| \leq \ell$. Másrészt, szintén az előző alfejezetben, az impulzusmomentum *nagyságára* a $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ értéket kaptuk. Az a különlegesség állt tehát elő, hogy az impulzusmomentum vetületének maximális értéke, $\hbar\ell$, mindig kisebb az impulzusmomentum nagyságának $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ értékénél $\ell \neq 0$ esetén.




**15.Ábra. Az impulzusmomentum precesszálása a $z-$ tengely körül.**

Ezt a meglepő eredményt szemléletesen úgy is megfogalmazhatjuk, hogy a koordináta rendszer $z-$tengelyét nem vehetjük fel az impulzusmomentum vektor irányában, vagyis az impulzusmomentum vektora nem forgatható be egyik tengely irányába sem (ld. 15. ábra). *Magyarázat:* a (32a) csererekáció miatt élesen meghatározott $L_z$ állapot (azaz sajátállapot) esetén $L_x, L_y$ csupán elmosódott, hibaszórással rendelkező, nem élesen meghatározott értéket vehet fel, így zérus sem lehet.

*b)* Az $\ell$ impulzusmomentummal kapcsolatos kvantumszám zérus értéket is felvehet, míg a bevezetőben tárgyalt Bohr-modellben ($\ell \equiv n =$)1 volt a legkisebb érték az impulzusmomentumra (ld. 1.5. fejezet). [A következő fejezetben fogjuk látni, hogy a H-atom alapállapotában $\ell = 0$, azaz keringésről nem beszélhetünk: az alapállapotú elektron minden keringés nékül tartózkodik a mag körül; a magba való be nem esését a Heisenberg-féle bizonytalansági reláció segítségével érthetjük meg.]

*c)* A Bohr elmélet szerint az impulzusmomentum nagysága általánosságban az impulzusmomentum dimenzóval rendelkező $\hbar$ állandó *egész számú* többszöröse lehetett, míg a kvantummechanika alapján az előző fejezetben azt kaptuk, hogy az impulzusmomentum $\hbar-$nak *nem egész* számú ($\sqrt{2}$, $\sqrt{6}, ...$ stb.) többszöröse. Azt, hogy az impulzusmomentum $|\mathbf{L}|$ nagyságára nézve a Bohr-féle $\hbar\ell$ képlet, vagy a kvantummechanika által megadott $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ kifejezés a helyes, a tapasztalat kell eldöntse.

### 4.3.6. A KÉTATOMOS MOLEKULÁK FORGÁSI (ROTÁCIÓS) ENERGIASPEKTRUMA. [Kísérleti bizonyíték az $|\mathbf{L}| = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ képlet helyességére vonatkozóan.]

Kétatomos molekulák (pl. a HCl sósav molekula) színképét jó közelítéssel a

$$H = H_{törzs} + H_{rot}$$

szerkezetű energiaoperátor határozza meg, ahol $[H_{törzs}, H_{rot}] = 0$. Itt $H_{törzs}$ a molekula elektronjainak $E = E_A, E_B, ..$ energiaállapotait határozza meg

$$H_{törzs}\psi = E\psi$$

révén, $H_{rot}$ pedig az erre szuperponálódó (lényegesen kisebb) rotációs energiáért felelős. A két atom közös tömegközéppont körül való forgását leíró $H_{rot}$ rotációs energiaoperátort kifejezhetjük a forgás impulzusmomentumával is:

$$H_{rot} = \frac{\mathbf{L}^2}{2\Theta},$$

ahol $\Theta$ a molekula tehetetlenségi nyomatékával azonosítható. A molekula forgási energiáját a

$$H_{rot}\psi = \frac{\hbar^2}{2\Theta}\ell(\ell+1)\psi$$

Schrödinger egyenlet, míg a molekula teljes energiáját a

$$H\psi = \left[E + \frac{\hbar^2}{2\Theta}\ell(\ell+1)\right]\psi$$

teljes Schrődinger egyenlet határozza meg. A molekula rotációs spektruma akkor keletkezik, amikor az elektron-szerkezet $E_A \to E_B$ változásával egyidejűleg a forgási állapotban is egy $\ell' \to \ell$ kvantumszám változás történik. Az átmenet során kisugárzott fénykvantum energiáját meghatározó összefüggés a következő:

$$h\nu_{AB} = E_A - E_B + \frac{\hbar^2}{2\Theta}\left[\ell'(\ell'+1) - \ell(\ell+1)\right].$$

Később (ld. 7. fejezet) megindoklandó okok miatt az $\ell' = \ell \pm 1$ kiválasztási szabály kell érvényesüljön az $\ell' \to \ell$ rotációs átmenetre. A szögletes zárójelben álló kifejezés ekkor a következő értékeket veheti fel:

$$\text{ha} \quad \ell' > \ell, \quad \text{azaz} \quad \ell' = \ell + 1, \quad [\ell'(\ell'+1) - \ell(\ell+1)] = \phantom{-}2(\ell+1), \quad \ell = 0, 1, 2, ...$$

$$\text{ha} \quad \ell' < \ell, \quad \text{azaz} \quad \ell' = \ell - 1, \quad [\ell'(\ell'+1) - \ell(\ell+1)] = -2(\ell'+1), \quad \ell' = 0, 1, 2, ...$$

A spektrum frekvenciájára tehát a

$$\nu_{AB} = C_{AB} + 2B \times \begin{cases} \phantom{-}(\ell+1) & (\ell = 0, 1, 2, ...) \\ -(\ell'+1) & (\ell' = 0, 1, 2, ...) \end{cases}$$

képlet a jellemző, ahol $C_{AB} = (E_A - E_B)/h, B = h/8\pi^2\Theta$. A színkép ezek szerint egymástól $2B$ távolságra eső vonalakból áll, kivéve a legalacsonyabb ($\ell$, vagy $\ell'$ zérus) rotációs gerjesztéseknek megfelelő részt, amelyre az úgynevezett "nullvonal hiány" a jellemző (ld. 16. ábra).

Tanulságos az iménti levezetést összevetni a Bohr-elmélet által jósolt eredménnyel. A Bohr-elmélet szerint a kisugárzott fény energiája

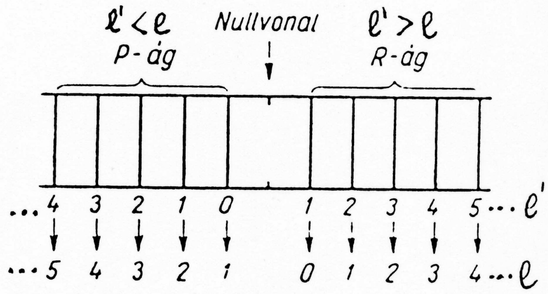
$$h\nu_{AB} = E_A - E_B + \frac{\hbar^2}{2\Theta}\left[\ell'^2 - \ell^2\right]$$

lenne, s ez a

$$\nu_{AB} = C_{AB} + 2B \times \begin{cases} \left(\ell + \frac{1}{2}\right) & (\ell = 0, 1, 2, ...) \\ -\left(\ell' + \frac{1}{2}\right) & (\ell' = 0, 1, 2, ...) \end{cases}$$

képletet szolgáltatná a spektrumvonalak szerkezetére, amelyben ezek szerint nem lenne nullvonal hiány, a spektrumvonalak egyöntetűen, egymástól egyforma távolságra helyezkednének el.

A kétatomos molekulák rotációs spektrumában megfigyelt "nullvonal hiány" tehát direkt kísérleti bizonyítékot szolgáltat a kvantummechanika $|\mathbf{L}| = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar$ képletének helyességére a Bohr-elméletből következő $\ell\hbar$ képlettel szemben.




**16.Ábra.** A kétatomos molekulák rezgési- vagy elektronátmenettel kombinált rotációs színképe

## 4.4. AZ ENERGIA OPERÁTORÁNAK SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI.

A kvantummechanikának leggyakoribb alkalmazási területét éppen a kvantummechanikai részecskerendszerek (atomok, molekulák, atommagok, szilárd testek, klaszterek, vegyületek, stb.) lehetséges energiaértékeinek és az ezekhez tartozó hullámfüggvényeknek a meghatározása képezi. Mindez a Schrödinger egyenlet megoldását jelenti, amely csupán a legegyszerűbb valóságos kvantumfizikai rendszerre, az egyetlen elektront Coulomb kölcsönhatással magához láncoló atommag esetére ismert analitikus formában.

A továbbiakban ezen legegyszerűbb kvantummechanikai rendszerek, a hidrogénatom és a hidrogénszerű ionok példáján keresztül mutatjuk be, hogy a kötött állapotban levő fizikai rendszerek energiája *kvantált*, és az (általában végtelen számú) energia sajátértékek a megoldás során fellépő kvantumszámok segítségével egyértelműen klasszifikálhatók.

### 4.4.1. A HIDROGÉNATOM ÉS A HIDROGÉNSZERŰ IONOK KVANTUMELMÉLETE.

Tekintsünk egy ponthoz rögzített, $Z$ protont tartalmazó atommagot és egyetlen "körülötte keringő" $m_e$ tömegű elektront.

A Bohr-elmélet az ilyen fizikai rendszer energiaértékeire az

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{m_e(kZe^2)^2}{\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \qquad n = 1, 2, ...$$

képletet szolgáltatta, ahol az $n$ kvantumszám, a Bohr-féle kvantumfeltétel révén, az impulzusmomentummal volt kapcsolatos (ld. 1.5. fejezet).

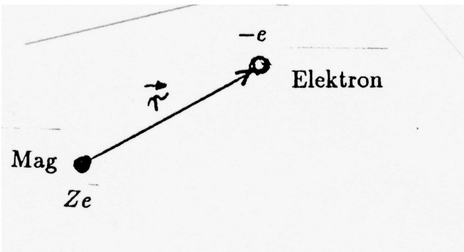
A kvantummechanikában az energiaértékeket a

$$H\psi = E\psi$$

Schrödinger egyenlet megoldása révén kapjuk, ahol az adott fizikai rendszer

$$H = T + V$$

energiaoperátora a $T$ kinetikus energia és $V$ potenciális energia részből tevődik össze. Az elektron potenciális energiájának operátora a Coulomb kölcsönhatás miatt a következőképpen írható:



**17.Ábra. A hidrogénszerű ion szerkezetének vázlata.**

$$V = -k\frac{Ze^2}{r}, \quad k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0},$$

ahol $\epsilon_0$ a dielektromos állandó, $r$ az elektron–atommag távolság, $e$ az elemi töltés, $Z$ pedig a rendszám (ld. 17. ábra).

Az elektron kinetikus energiájának operátora

$$T = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m_e} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta$$

felírható gömbi polárkoordinátákban is:

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\mathbf{L}^2(\vartheta,\varphi)}{2m_e r^2},$$

ahol felhasználtuk az előző fejezet eredményét az $\mathbf{L}^2$ impulzusmomentum négyzetének operátor kifejezésére vonatkozóan.

A fenti eredményhez másképpen is eljuthatunk, a $\mathbf{p}^2$ operátor vizsgálatával.

A *klasszikus* mechanika szerint

$$\mathbf{L}^2 = (\mathbf{r}\times\mathbf{p})^2 = r^2p^2 - (\mathbf{r},\mathbf{p})^2,$$

amiből

$$\mathbf{p}^2 = p^2 = \frac{\mathbf{L^2}}{r^2} + p_r^2, \quad \text{ahol} \quad p_r \equiv \left(\mathbf{p}, \frac{\mathbf{r}}{r}\right).$$

A *kvantum*mechanika szerint figyelembe kell venni az $\mathbf{r}$ és $\mathbf{p}$ közti felcserélési törvényt, amely miatt egy további, pusztán kvantummechanikai eredetű tag járul a fenti klasszikus összefüggéshez:

$$\mathbf{L}^2 = (\mathbf{r}\times\mathbf{p})^2 = r^2p^2 - (\mathbf{r},\mathbf{p})^2 + i\hbar(\mathbf{r},\mathbf{p}),$$

amiből

$$(\mathbf{r},\mathbf{p}) = \frac{\hbar}{i}(\mathbf{r},\nabla_{\mathbf{r}}) = \frac{\hbar}{i}r\frac{\partial}{\partial r}, \qquad \left[\text{mivel} \quad \nabla = \left(\frac{\partial}{\partial r},\dots\frac{\partial}{\partial\vartheta},\dots\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right]$$

felhasználásával kapjuk:

$$p^2 = \frac{\mathbf{L^2}}{r^2} - \hbar^2\frac{1}{r^2}r\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r} - \hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} \equiv \frac{L^2}{r^2} + \hat{p}_r^2.$$

Centrális tér esetén tehát a kinetikus energia operátorban szereplő $p^2$ operátornak többféle alakjával találkozhatunk az irodalomban. Álljon itt ezekből néhány emlékeztetőül:

$$p^2 = p_r^2 + \frac{L^2}{r^2},$$

$$p^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{L^2}{r^2},$$

$$p^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{L^2}{r^2},$$

$$p^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\right) + \frac{L^2}{r^2},$$

$$p^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\right)^2 + \frac{L^2}{r^2}.$$

Az utolsó kifejezést az elsővel összehasonlítva megállapíthatjuk, hogy a *radiális impulzus* operátorát a

$$p_r = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$$

kifejezés definiálja. Az érdekességet itt az $\frac{1}{r}$–es tag megjelenése jelenti a differenciál operátor mellett, mert naívan általánosítva, a radiális impulzus operátorára csak az első tagot (a nabla operátor radiális komponensét) gondolhatnánk eredményül. Könnyen belátható azonban, hogy $p_r$ csak ezen második tag fellépése esetén hermitikus ($p_r = p_r^+$), valamint ezzel együtt teljesül a következő felcserélési reláció is:

$$[p_r, r] = \frac{\hbar}{i}.$$

A teljes energia operátora (amit átalában Hamilton operátornak szoktak nevezni) a H-atom esetében tehát jól elkülönülő radiális és szögfüggő részekből áll, a szögfüggő rész pedig az impulzusmomentum operátor négyzetével kapcsolatos, amelynek problémáját az előző fejezetben megoldottuk. Így, kereshetjük a megoldást a következő szeparált alakban:

$$\psi(r,\vartheta,\varphi) = \frac{1}{r}R(r)Y_\ell^m(\vartheta,\varphi).$$

A Schrödinger egyenletbe való helyettesítés és az impulzusmomentum négyzetre vonatkozó

$$\mathbf{L}^2 Y_l^m(\vartheta,\varphi) = \hbar^2\ell(\ell+1)Y_l^m(\vartheta,\varphi)$$

sajátérték egyenletet kihasználása után az ún. *radiális Schrödinger egyenlet*et nyerjük az $R(r)$ *radiális hullámfüggvény* meghatározására vonatkozóan:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - kZ\frac{e^2}{r}\right)R(r) = ER(r). \tag{38}$$

#### 4.4.1.a) $E = -|E|$, KÖTÖTT ÁLLAPOT ESETE. DISZKRÉT SPEKTRUM.

A (38) egyenletben szereplő $E$ sajátérték, a teljes energia mindig negatív, $E = -|E|$, amennyiben kötött részecske rendszerről van szó. ($E = 0-$át éppen az egymástól végtelen távolságra levő és így egymással kölcsönhatásban sem álló, nyugalomban levő részecskékből álló rendszer energiájával definiáljuk; ehhez képest a kölcsönható rendszer energiája kisebb [negatív], mivel energiát kell befektetnünk ahhoz, hogy ezt az idealizált nem-kölcsönható állapotot létrehozzuk. Harmonikus oszcillátor és végtelen mély potenciálvölgy esetén az $E = 0$ pontot természetesen másként kell definiálni.)

A megoldást a már jól ismert Sommerfeld-féle polinom módszerrel fogjuk megkapni (ld. harmonikus oszcillátor, 2.3. pont).

Az

$$r_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{2m_e|E|}}, \quad \varepsilon = k\frac{Zm_e e^2}{\hbar^2}r_0 = Z\frac{r_0}{a_0} = \sqrt{\frac{m_e e^4 Z^2 k^2}{2\hbar^2|E|}}$$

jelölések bevezetése és a

$$\xi = \frac{2r}{r_0} \quad \left( \rightarrow \quad \frac{1}{r} = \frac{1}{\xi}\frac{2}{r_0}, \quad \frac{d^2}{dr^2} = \frac{4}{r_0^2}\frac{d^2}{d\xi^2}\right)$$

skálatranszformáció elvégzése után a radiális Schrödinger egyenlet a következő egyszerűbb formát ölti:

$$\frac{d^2R}{d\xi^2} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\varepsilon}{\xi} - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2}\right]R = 0.$$

Ennek aszimptotikus alakja

$$R_a'' = \frac{1}{4}R_a,$$

amelynek megoldása

$$R_a = e^{-\frac{1}{2}\xi}.$$

A teljes megoldást az

$$R = u(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi}$$

alakban keressük, ahol $u$ egy polinom. Szükségünk lesz R első és második deriváltjára:

$$R' = (u' - \frac{1}{2}u)e^{-\frac{1}{2}\xi}, \quad R'' = (u'' - 2 \cdot \frac{1}{2}u' + \frac{1}{4}u)e^{-\frac{1}{2}\xi}.$$

Behelyettesítés után $u-$ra a következő differenciálegyenletet nyerjük:

$$u'' - u' + \left(\frac{\varepsilon}{\xi} - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2}\right)u = 0.$$

Látjuk, hogy $\xi = 0$ esetén az egyenletnek szingularitása van. Ezen szingularitást kiküszöbölendő, az $u$ polinom nem kezdődhet konstanssal, legkisebb fokszáma $\xi^s \quad (s > 0)$ kell legyen. Ezt rögtön kiemelve, az $u$ polinomunk (a szükséges első és második deriváltakkal együtt) a következőképpen írható:

$$u = \xi^s \sum_{i=0}^{\infty} c_i \xi^i = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \xi^{i+s}, \quad s > 0,$$
$$u' = \sum_{i=0}^{\infty} c_i (i+s)\xi^{i+s-1}, \quad s > 0,$$
$$u'' = \sum_{i=0}^{\infty} c_i (i+s)(i+s-1)\xi^{i+s-2}, \quad s > 0.$$

Behelyettesítés után az egyenlet a

$$\sum_{i=0}^{\infty} c_i \Big[(i+s)(i+s-1) - \ell(\ell+1)\Big]\xi^{i+s-2} + \sum_{i=0}^{\infty} c_i \Big[\varepsilon - (i+s)\Big]\xi^{i+s-1} = 0$$

alakú. Ezt az összefüggést átalakíthatjuk úgy, hogy az első összegzésben szereplő legalacsonyabb fokszámú tagot külön kiírjuk ($i = 0$ esete), a második összegzést pedig az $i \to i-1$ helyettesítéssel beolvasztjuk az első összegzés maradék részébe:

$$c_0\Big[s(s-1) - \ell(\ell+1)\Big]\xi^{s-2} +$$
$$\sum_{i=1}^{\infty}\Big\{c_i\Big[(i+s)(i+s-1) - \ell(\ell+1)\Big] + c_{i-1}\Big[\varepsilon - (i-1+s)\Big]\Big\}\xi^{i+s-2} = 0.$$

Az egyenlet $\xi$ tetszőleges értékeire csak akkor állhat fenn, ha $\xi$ minden hatványának együtthatója külön-külön zérus. Az első tagból kapjuk:

$$s(s-1) = \ell(\ell+1), \qquad \to \qquad s = \ell + 1,$$

amely rögzíti az $s$ ún. *indiciális index* értéket. (Megjegyezzük, hogy ennek az indiciális egyenletnek a másik megoldása, $s = -\ell$, az origóban szinguláris, tehát irreguláris hullámfüggvény megoldásra vezetne, amelyet ki kell zárnunk a regularitási követelmény miatt. A szóráselméleti részben [ld. 6. fejezet] az irreguláris megoldásnak azonban fontos szerepe lesz.) A második tagból egy *rekurziós* formulát kapunk a polinom együtthatóira nézve:

$$c_i = \frac{i + \ell - \varepsilon}{(i+\ell+1)(i+\ell) - \ell(\ell+1)}c_{i-1}, \quad i = 1, 2, \ldots.$$

Ez a rekurziós kifejezés a polinom magas hatványai esetén a

$$c_i \sim \frac{1}{i}c_{i-1}, \qquad i \to \infty$$

összefüggést szolgáltatja, amelyben az $e^\xi = \sum \xi^i/i!$ sorának rekurziós képletét ismerhetjük fel. Mivel az $e^\xi$ függvény majorálja az $R_a = e^{-\xi/2}$ aszimptotikus megoldást $\xi$ nagy értékeire, szükséges az, hogy az

$u$ polinom véges fokszámú legyen, azaz valahol megszakadjon. Ez úgy lehetséges, ha létezik egy $i_{max}$ legmagasabb összegző index, amelyre $c_{i_{max}-1} \neq 0$, de $c_{i_{max}} = 0$ már. Ez akkor kövekezik be, ha a rekurziós képlet számlálója ezen legmagasabb fokszám esetére zérussá válik:

$$i_{max} + \ell - \varepsilon = 0, \quad i_{max} = 1, 2, \cdots .$$

Bevezetve az $n = i_{max} + \ell$ jelölést ($n = 1, 2, \cdots$), megállapíthatjuk a fenti levezetésből, hogy ahhoz, hogy a hidrogén atom (és a hidrogénszerű ion) problémájára reguláris megoldást kapjunk, szükséges az, hogy az (energiát is tartalmazó) $\varepsilon$ állandó valamelyik zérustól különböző pozitív egésszámú $n$ értéket vegye fel:

$$\varepsilon = k\frac{Zm_e e^2}{\hbar^2} r_0 = Z\frac{r_0}{a_0} = \sqrt{\frac{m_e e^4 Z^2 k^2}{2\hbar^2 |E|}} = n, \qquad n = 1, 2, ...,$$

amelyből az *energiasajátértékek*re az

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{m_e (kZe^2)^2}{\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \qquad n = 1, 2, ... \tag{39}$$

képletet nyerjük. Ez formálisan megegyezik a Bohr-elmélet energiaképletével, viszont tartalmilag különbözik tőle. A levezetés során láttuk ugyanis, hogy az $n$ kvantumszámnak nem direkt, hanem csak áttételes kapcsolata van az impulzusmomentummal. A Bohr elméletben $n$ közvetlenül az impulzusmomentumot számlálta le. A kvantummechanikai levezetés során az impulzusmomentumot az $\ell$ kvantumszám jellemzi, amely lehet zérus is ($n = 1$ esetén).

[A kvantumszámok egymással való összefüggésére a következő meggondolásból lehet következtetni:

$$n = i_{max} + \ell, \quad i_{max} = 1, 2, ... \quad \rightarrow \quad n = \ell + 1, \ell + 2, ... \quad \rightarrow \quad \ell_{max} = n - 1.$$

Ily módon felső korlátot kaptunk az impulzusmomentumra az energiaértékeket meghatározó $n = 1, 2, ...$ kvantumszám függvényében. Természetesen $n$ az $R(r)$ radiális hullámfüggvény zérushelyeinek számával is kapcsolatos, amit $n - \ell - 1 = i_{max} - 1$ ad meg.]

A tárgyalandó probléma teljes megoldásához hátra van még a hullámfüggvény felírása. Ez a következő alakban áll elő:

$$\psi_{n\ell m}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{r} R_{n\ell}(r) Y_\ell^m(\vartheta, \varphi), \tag{40a}$$

ahol a radiális Schrödinger egyenletet kielégítő *radiális* hullámfüggvény

$$R_{n\ell}(r) = L_{n\ell}(\frac{2r}{r_0}) e^{-r/r_0}, \quad r_0 = a_0 n/Z, \tag{40b}$$

$a_0 = \hbar^2/m_e k e^2 \sim 0,53 \times 10^{-10} m$ a Bohr sugár, $L_{n\ell}$ pedig (a korábban $u-$val jelölt) az $(\ell+1)$ hatvánnyal kezdődő $(n+1)-$ed fokú ún. Laguerre-polinom. (Ne tévesszük össze az itteni $r_0$ állandót a Bohr elmélet tárgyalásánál használt $r_n = \frac{a_0}{Z} n^2 = n r_0-$lal !) A radiális hullámfüggvények ortonormáltak:

$$\int_0^\infty dr\, R_{n\ell}^* R_{n'\ell} = \delta_{nn'}.$$

Az alábbiakban megadunk néhányat közülük:

$$R_{10}(r) = 2r \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0},$$

$$R_{20}(r) = 2r \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right) e^{-Zr/2a_0},$$

$$R_{21}(r) = \frac{2r}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{2a_0}e^{-Zr/2a_0},$$

$$R_{30}(r) = 2r\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\left[1-\frac{2Zr}{3a_0}+\frac{2(Zr)^2}{27a_0^2}\right]e^{-Zr/3a_0}.$$

A radiális hullámfüggvények $R_{nl} \to r^{\ell+1}$–ként tartanak az origóban ($r \to 0$) a nullához. A teljes hullámfüggvény viszont $\psi_{nlm} \to r^{\ell}$–ként, miközben $r \to 0$. Ezért véges valószínűségsűrűsége van annak, hogy az elektron a mag helyén tartózkodik alapállapot esetén. Sőt, $\psi_{100}(r,\vartheta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\exp(-Zr/a_0)$ miatt az elektronnak éppen a magban való tartózkodási valószínűségsűrűsége a legnagyobb. Ugyanis, az elektron tartózkodási valószínűségsűrűségét az $(r,\vartheta,\varphi)$ pontban éppen $|\psi_{nlm}(r,\vartheta,\varphi)|^2$ adja meg. Ha viszont az iránt érdeklődünk, hogy milyen *valószínűséggel* találjuk meg az elektront egy $\mathbf{r} = (r,\vartheta,\varphi)$ körüli $d^3r$ térfogatelemben, akkor ennek meghatározására a

$$|\psi|^2 d^3r = \frac{1}{r^2}R_{nl}^2(r)|Y_\ell^m(\vartheta,\varphi)|^2 r^2\,dr\,d(\cos\vartheta)\,d\varphi \equiv W_{n\ell}(r)\,dr\,|Y_\ell^m(\vartheta,\varphi)|^2\,d(\cos\vartheta)\,d\varphi$$

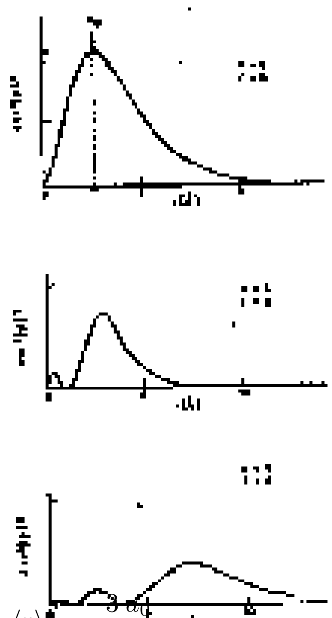
képlet szolgál, amelyben a $W_{n\ell}(r) = R_{n\ell}^2$ mennyiséget *radiális* valószínűségnek nevezzük. A radiális valószínűség tehát azt fejezi ki, hogy milyen valószínűséggel tartózkodik az elektron egy $r, r+dr$ gömbhéjban. A $W_{n\ell}$ valószínűség már azt a fizikai képet adja az atombeli elektron elhelyezkedéséről, amit klasszikus szemléletünk alapján várunk: az origó körül zérus valószínűséggel található az elektron ($W_{n\ell}(0) = 0$), a

$$0 = \left.\frac{dW_{nl}}{d\,r}\right|_{r_{nl}}$$

egyenlettel definiált $r_{n\ell}$ sugarú gömbhéjban viszont maximális valószínűséggel található meg az elektron. Konkrét számolással néhány $r_{n\ell}$ mennyiségre a következő érték adódik:

$$r_{10} = \frac{a_0}{Z}, \quad r_{21} = 4\frac{a_0}{Z}, \quad ..., \quad r_{n,n-1} = n^2\frac{a_0}{Z}.$$

Ezek tehát a Bohr elmélet szolgáltatta pályasugarak. A 18/a ábrán bemutatott néhány $W_{n\ell}(r)$ valószínűség függvény a főhéjak térbeli elhelyezkedését szemlélteti.



18/a. ábra. A hidrogénatombeli elektron radiális eloszlási valószínűsége néhány ($n\ell$) állapotban.

Feltehetjük azt a kérdést is, hogy mi az *átlag*értéke a radiális koordinátára vonatkozó mérésnek? A választ az $\langle r\rangle$ kifejezés adja meg:

$$\langle r\rangle_{n\ell} = \int_0^\infty dr\,r\,R_{n\ell}^2(r) = \int dr\,r\,W_{n\ell}(r) = \frac{1}{2}\frac{a_0}{Z}(3n^2-\ell(\ell+1)). \quad \text{Pl.} \quad \langle r\rangle_{10} = \frac{3}{2}\frac{a_0}{Z}.$$

*Hermiticitás:* Könnyen belátható, hogy a H-atom energiaoperátora hermitikus a reguláris függvények terén.

*Ortonormáltság:* A H-atom kötött állapoti energiasajátfüggvényei ortonormált függvényrendszert alkotnak. Figyelemmel a radiális hullámfüggvények, és a gömbfüggvények ortogonalitására,

$$\langle\psi_{n\ell m}|\psi_{n'\ell'm'}\rangle = \delta_{nn'}\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}.$$

#### 4.4.1.b) $E \geq 0$, SZÓRÁSI ÁLLAPOT ESETE. FOLYTONOS SPEKTRUM.

Ahhoz, hogy a H-atom sajátfüggvények teljes rendszert képezzenek, szükség van a pozitív energiájú állapotokhoz tartozó megoldások figyelembevételére is, mert a kötött állapoti sajátfüggvények önmagukban *nem* alkotnak teljes rendszert.

A folytonos spektrumhoz tartozó energiasajátfüggvényeket $\psi_E(\mathbf{r})-$vel jelölve, bizonyítható a *teljességi összefüggés:*

$$\sum_{nlm} \psi_{nlm}(\mathbf{r})\psi^*_{nlm}(\mathbf{r}') + \int_0^\infty dE\, \psi_E(\mathbf{r})\psi^*_E(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

A $\psi_E$ folytonos spektrumhoz tartozó ún. Coulomb-hullámfüggvényekkel később, a 6-ik fejezetben ismerkedünk meg.

### 4.4.2 A HIDROGÉNATOM VONALAS SZíNKÉPE.

A hidrogénatom vonalas színképének (ld. 18. ábra) megértését a kvantummechanika tette lehetővé. Az előforduló kvantumszámok és elnevezéseik a következők:

*főkvantumszám*: $n = 1, 2, 3, ...$

*mellékkvantumszám*: $\ell = 0, 1, 2, ..., n-1$

*mágneses kvantumszám*: $m = -\ell, -\ell+1, .., 0, .., \ell-1, \ell$

Minthogy a (39)-es energiasajátérték csak a főkvantumszámtól függ, az egyes energiaszintek elfajultak. A degeneráció foka: $\sum_{\ell=0}^{n-1}(2\ell+1) = n^2$. Az $n-$nel jellemzett szinteket *főhéj*nak nevezzük. Adott $n$ esetén a hozzátartozó különböző $\ell-$ű állapotok *alhéjat* alkotnak; *jelük:* $(n\ell)^x$, ahol $x$ jelenti az alhéjba tartozó elektronok számát. Az $\ell$ mellékkvantumszámoknak az abc különböző betűit feleltetjük meg: az $\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, ..$ stb. kvantumszámokat rendre az $s, p, d, f, g, h, i, ..$ stb. betűkkel jelöljük. Így pl. beszélünk $(1s), (2p)^3, (3d)^2, ..$ stb. alhéjakról.

Az alapállapoti szintet $n = 1$ jellemzi:

$$E_1 = -13,6\, eV, \quad \ell = 0.$$

Az első gerjesztett állapotot $n = 2$ esetén kapjuk:

$$E_2 = E_1/4, \quad \ell = 0, 1.$$

A harmadik $(n = 3)$ szinthez tartozó energia és mellékkvantumszámok értékei:

$$E_3 = E_1/9, \quad \ell = 0, 1, 2.$$

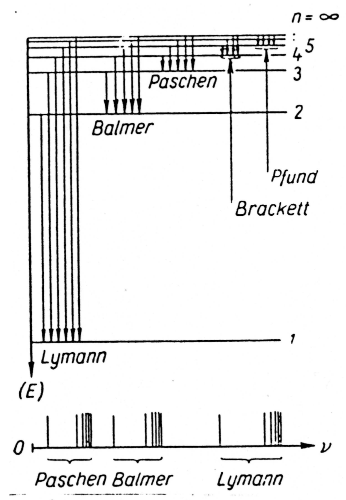
A hidrogénatom gerjesztett állapotainak száma végtelen.

A hidrogénatom színképe egymástól elkülönülő részekből áll.

Az ultraibolya frekvenciatartományba eső ún. *Lyman*-sorozat akkor keletkezik, amikor a gerjesztett "pályákról" az alapállapotba $(n = 1)$ történik a legerjesztődés.

*Balmer*-sorozatnak hívjuk a színkép (látható tartományba eső) azon részét, amely az $n = 2$ szintre való legerjesztődés révén keletkezik.

Infravörös tartományba eső kis energiák tartoznak azon kisugárzásokhoz, amelyekben az $n = 3$-as szint a legerjesztődés első állomása; ez a *Paschen*-sorozat.




**18.Ábra. A hidrogénatom színképének keletkezése.**

## 4.5. A SPIN OPERÁTORÁNAK SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI.

### 4.5.1. KÍSÉRLETI BIZONYÍTÉKOK AZ ELEKTRONSPIN LÉTÉRE.

A XX. század 20-as éveiben egyre inkább uralkodóvá vált az a felfogás, hogy az elektronnak saját impulzusmomentummal, *spin*nel kell rendelkeznie. Ezt az álláspontot sokféle kísérleti evidencia támasztotta alá.

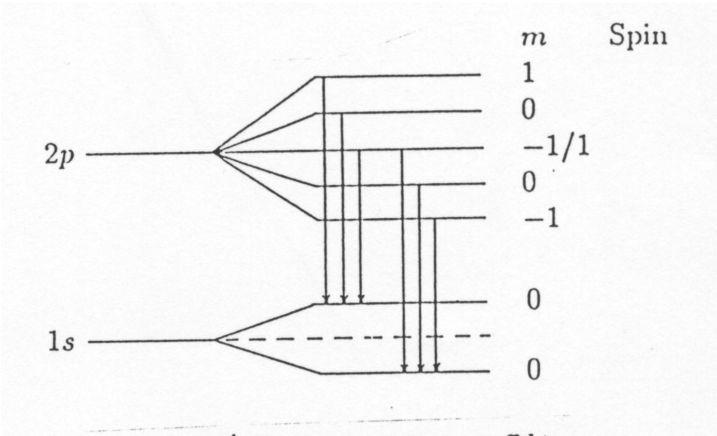
*a) A közönséges Zeeman-effektus:* A XIX. század végén Zeeman holland fizikus a hidrogénszínkép tanulmányozása közben észrevette, hogy homogén mágneses tér hatására a színképvonalak kiszélesednek és felhasadnak.

A jelenség az atomi energianívók felhasadásával magyarázható. A klasszikus elektrodinamikából ismeretes, hogy a köráram mágneses teret kelt. Az atomban az $\mathbf{L}$ impulzusmomentummal rendelkező elektron elemi köráramot képvisel, amelynek mágneses tere a kör felületére merőleges irányban

$$B = If = \left(\frac{-ev}{2\pi r}\right) r^2\pi = -\frac{e}{2m_e} r m_e v.$$

Ennek alapján az $\mathbf{L}$ impulzusmomemtumhoz tartozó elemi mágneses momentum

$$\mathbf{M}^L = -\frac{e\hbar}{2m_e}\frac{1}{\hbar}\mathbf{L} \equiv -\mu_B \frac{1}{\hbar}\mathbf{L}, \qquad (41a)$$




**19.Ábra. A Zeeman-effektus értelmezése.**

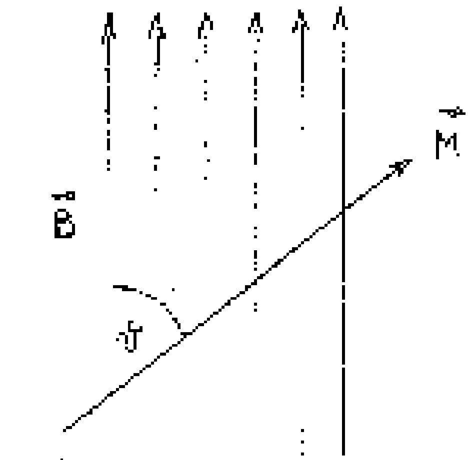
$$M_z^L = -\frac{e\hbar}{2m_e}\frac{1}{\hbar}L_z \equiv -\mu_B \frac{1}{\hbar}L_z, \qquad (41b)$$

ahol a $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ arányossági tényező neve: Bohr magneton. Értéke: SI-ben $9.27 \times 10^{-24}$ J/T, cgs-ben $9.27{\times}10^{-21}$ erg/G.

A $\mathbf{B} = (0, 0, \mathcal{B})$ homogén mágneses tér erőhatást gyakorol a mágneses dipólusra. Az ennek megfelelő potenciális energia a

$$V^L_{mágn} = -(\mathbf{M}^L, \mathbf{B}) = \mu_B \frac{1}{\hbar} L_z \mathcal{B} = \mu_B m_\ell \mathcal{B}$$

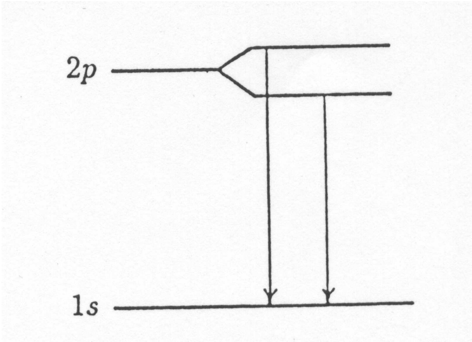
alakba írható, amely – a teljes Hamilton operátort módosítva – az atomi elektronnívók $[(2\ell+1)-$szeres$]$ felhasadásához vezet. Tehát pl. a $p-$ nívó felhasadása háromszoros. Ezzel szemben a színképek tanulmányozása arra a következtetésre vezetett, hogy a $p-$ nívó felhasadása *ötszörös* (ld. 19. ábra).




19/b.Ábra. A mágneses potenciális energia [illegible]

*b) Anomális Zeeman-effektus:* Bizonyos esetekben (pl. páratlan rendszámú atomok esetén) külső mágneses tér hiányában is észleltek nívófelhasadást a színképek gondos tanulmányozása révén.

Úgy tűnt tehát, hogy az elektron egy további szabadsági fokkal rendelkezik, és ez saját impulzusmomentumban (*spin*ben) nyilvánul meg, amelyhez (töltött részecskéről lévén szó) saját mágneses momentum társul. Ez utóbbinak az atom belső mágneses terével való kölcsönhatása eredményezi aztán a megfigyelt dublett szerkezeteket (20. ábra). A dublett szerkezet egyúttal azt is sugallta, hogy ezen új szabadsági fokhoz feles kvantumszám társul.




20.Ábra. Kettős felhasadás.

*c) Stern-Gerlach kísérlet (1922):* Stern és Gerlach keskeny, ezüst atomokból álló nyalábot bocsátott át inhomogén mágneses téren. A tér az Ag-atom nyalábot *két részre* osztotta (21. ábra).

Mivel az Ag-atom zárt héjjal s azon kívül levő egyetlen elektronnal rendelkezik, amely az $n = 5$ és $\ell = 0$ kvantumszámmal jellemzett állapotban van, az ezüst atom teljes pálya impulzusmomentuma ($\mathbf{L}$) zérus, az ebből eredő mágneses nyomaték ($\mathbf{M}^L$) tehát zérus. Ha létezik spin (saját impulzusmomentum), egyedül ez hordozhat mágneses nyomatékot ($\mathbf{M}^S$), amit meg lehet mérni *inhomogén* mágneses tér alkalmazásával. A mágneses kölcsönhatás potenciális energiája ugyanis

$$V^S_{mágn} = -(\mathbf{M}^S, \mathbf{B}),$$

és a nyalábra (az Ag-atomokra) ható erő

$$-\nabla V^S_{mágn} = \nabla M^S_z \mathcal{B}(z) = (0, 0, F_z)$$

$$F_z = M^S_z \frac{d\mathcal{B}(z)}{dz}$$

$F_z$ az eltérülés mértékéből meghatározható, $d\mathcal{B}(z)/dz$ kísérleti adat, így $M^S_z$ mérhető. A mérések $M^S_z = \mp\mu_B$ értéket szolgáltatták az ezüst atom külső elektronjának mágneses momentumára. Ez az eredmény az elektron saját impulzusmomentumának $z-$ komponenséhez feles kvantumszámot rendel, ugyanis

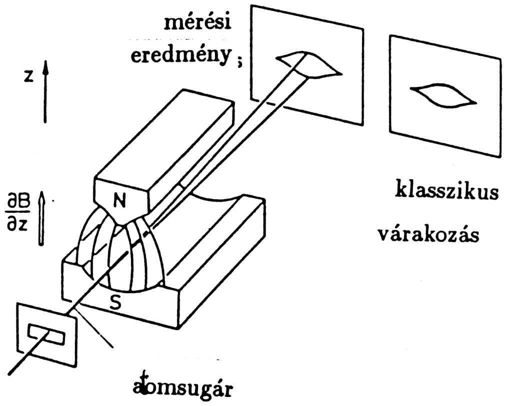
$$M^S_z = \mp\mu_B = -(2\mu_B)m_s \quad \rightarrow \quad m_s = \pm\frac{1}{2}$$

($m_s = egész$ a nyaláb legalább három részre való szakadását jelentené). Egyúttal kifejezi azt az érdekes körülményt is, hogy az elektron saját impulzusmomentumához *kétszer annyi* ($2\mu_B$) mágneses momentum tartozik, mint a pályamozgáshoz. Az elektron saját impulzusmomentumát **S**-sel jelölve, a spinből eredő mágneses momentum tehát a következőképpen írható:

$$\mathbf{M}^S = -2\mu_B \frac{1}{\hbar}\mathbf{S} \tag{41c}$$

Ezt az eredményt erősíti meg a következő kísérlet is.

*d) Einstein-de Haas kísérlet (1915):* Einstein és de Haas eredetileg azt vizsgálta, vajon igaz-e az a feltételezés, hogy az anyagok mágnesezhetőségéért (a ferromágnességért) az $\ell \neq 0$ impulzusmomentummal jellemezhető és ezért elemi köráramot képviselő (s így mágneses momentumot hordozó) elektronok pályaimpulzusmomentumának egyirányú beállása a felelős.




**21.Ábra.A Stern-Gerlach kísérlet szemléltetése.**

A 22. ábrán látható elrendezésben vékony szálon függő vashengert árammal átfolyt tekercsbe helyeztek. A tekercsben kialakuló mágneses tér egyirányba állítja be az ($i-$vel jelölt) elemi köráramok mágneses momentumát, amelynek eredője egyenesen arányos az elemi impulzusnyomatékok eredőjével:

$$\frac{\sum_i |\mathbf{M}_i|}{\sum_i |\mathbf{L}_i|} = \frac{M}{L} = \mu_B/\hbar,$$

az arányossági tényező $1\mu_B$ Bohr-magneton (per $\hbar$).

A tekercsen átfolyó áram irányának megváltoztatása az elemi köráramoknak megfelelő parányi "iránytűk" (mágneses momentumok) átfordulását eredményezi, amely az elemi impulzusmomentumok ellentettre vátozásával jár együtt. Az impulzusmomentum megmaradásának törvénye szerint ezt az impulzusmomentum változást a henger mérhető elfordulása kompenzálja, amit a torziós szálra erősített tükör segítségével meg lehet figyelni és mérni ($\Delta L_{mért}$). Ugyancsak mérni lehet a vashenger mágnesezettségét és az átmágnesezésből eredő mágneses tér változást ($\Delta M_{mért}$). A két mérhető mennyiség arányára Einstein és de Haas a

$$\frac{\Delta M_{mért}}{\Delta L_{mért}} = 2\mu_B/\hbar$$

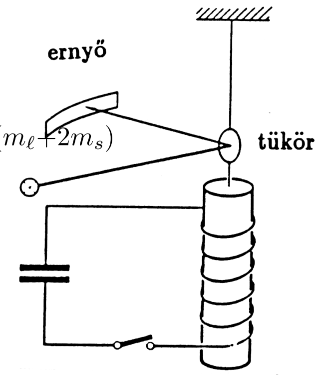
értéket kapták, amely a 2-es faktor megjelenése miatt csak úgy értelmezhető, hogy a ferromágnesség *nem* az elektronok pályaimpulzusmomentumával kapcsolatos, hanem az elektronok saját impulzusmomentumával, azaz spinjével. (Ezt az értelmezést csak később, Compton, Uhlenbeck, Goudschmidt, Pauli és Heisenberg munkássága révén sikerült megadni.)

### 4.5.2. A SPINOPERÁTOR SAJÁTÉRTÉKEI ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEI.

A fenti eredmények alapján megérthetjük a 19. ábrán bemutatott nívóséma multiplicitását. A $\mathbf{B} = (0, 0, \mathcal{B})$ $z-$irányú homogén mágneses térrel való kölcsönhatás révén keletkező

$$V_{mágn} = -(\mathbf{M}^L + \mathbf{M}^S, \mathbf{B}) = \mu_B \mathcal{B} \frac{1}{\hbar}(L_z + 2S_z) = \mu_B \mathcal{B}(m_\ell + 2m_s)$$

potenciális energiaoperátor $2(2\ell + 1)-$szeres nívófelhasadást eredményez, amelyből $\ell = 1$ esetén az egyik nívó kétszeresen degenerált ($m_s = \pm 1/2$ és $m_l = \mp 1$).




**22.Ábra. Einstein-de Haas kísérlet.**

A fenti eredmény implicite tartalmazza a spin $z-$komponensének sajátérték egyenletét:

$$S_z \chi_s^{m_s} = \hbar m_s \chi_s^{m_s}, \quad m_s = \pm\frac{1}{2}, \tag{42a}$$

ahol $\chi_s^{m_s}$ a spinoperátor négyzetének is sajátfüggvénye:

$$\mathbf{S}^2 \chi_s^{m_s} = \hbar^2 s(s+1) \chi_s^{m_s}, \quad s = \frac{1}{2}. \tag{42b}$$

A spinoperátor a pályaimpulzusmomentummal rokon felcserélési szabályoknak tesz eleget:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, \quad [S_z, S^2] = 0, \quad \text{stb.,} \quad \text{illetve} \quad [\mathbf{S}, \mathbf{r}] = 0, \quad [\mathbf{S}, \mathbf{p}] = 0, \quad [\mathbf{S}, \mathbf{L}] = 0.$$

Ez elegendő a spinoperátor és spinsajátfüggvény megalkotásához, amelyeknek a leginkább használatos reprezentációban felírt alakját levezetés nélkül közöljük ($\mathbf{S} = \hbar\vec{\sigma}/2$, $\vec{\sigma}$ komponensei az ún. *Pauli-matrixok*):

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{43a}$$

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, \qquad [\sigma_z, \sigma^2] = 0, \quad \text{stb.}$$

$$\alpha \equiv \chi_{1/2}^{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \beta \equiv \chi_{1/2}^{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{43b}$$

*Ortonormalitás:*

$$\chi_s^{m_s *} \chi_{s'}^{m'_s} = \delta_{ss'} \delta_{m_s m'_s} \qquad s = \frac{1}{2}, \, m_s = \pm\frac{1}{2}.$$

[A spin konzisztens bevezetése a 8. fejezetben történik meg, ahol a Dirac egyenlet adja meg a relativisztikus, feles spinű elektron elméletét a $2-$es faktorral együtt. A spin figyelembevétele a nemrelativisztikus számolásokban azonban mégis elengedhetetlen szimmetriát befolyásoló jelenléte és mágneses kölcsönhatásokban való részvétele miatt.]

### 4.5.3. A PAULI-SCHRÖDINGER EGYENLET.

Homogén mágneses térben mozgó elektron leírására a Pauli-energiaoperátor szolgál:

$$H_M = H_0 - (\mathbf{M}, \mathbf{B}), \qquad \mathbf{M} = \mathbf{M}^L + \mathbf{M}^S = -\mu_B \frac{1}{\hbar}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}),$$

ahol $H_0 = p^2/2m_e + V(\mathbf{r})$ az elektron kinetikus energia operátorát és más, nem a homogén mágneses térrel való kölcsönhatásból eredő potenciális energiáját jelöli.

A fenti energiaoperátor függ a spintől is, ezért az elektron állapotfüggvénye kifejthető a két lineárisan független $\alpha$ és $\beta$ spinfüggvény szerint:

$$\Psi(\mathbf{r}, t; spin) = \Psi_+(\mathbf{r}, t)\alpha + \Psi_-(\mathbf{r}, t)\beta,$$

ahol a kifejtési "együtthatók" éppen az elektron tér(és idő-)szerű állapotfüggvényei. Ezt a kifejtést az

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = H_M\Psi$$

állapotegyenletbe helyettesítve és a koordináta rendszer $z-$ tengelyét a külső mágneses tér irányába véve, azaz $\mathbf{B} = (0, 0, \mathcal{B})-$t véve, kapjuk az

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_+ = \left(H_0 - \mu_B\mathcal{B}(i\frac{\partial}{\partial\varphi} - 1)\right)\Psi_+$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_- = \left(H_0 - \mu_B\mathcal{B}(i\frac{\partial}{\partial\varphi} + 1)\right)\Psi_-$$

Pauli-egyenleteket, amelyek már figyelemmel vannak az elektron spinjére is.

### 4.5.4. A SPINOPERÁTOR IDŐBELI VÁLTOZÁSA.

Mágneses tér jelenléte esetén a spin nem mozgásállandó, mert

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[H_M, \mathbf{S}\right] = \frac{i}{\hbar}\left[\mathbf{S}, (\mathbf{M}, \mathbf{B})\right] = \frac{i}{\hbar^2}2\mu_B\left[(\mathbf{S}, \mathbf{B}), \mathbf{S}\right] = \frac{2i\mu_B}{\hbar^2}\frac{\hbar^2}{4}\left[(\vec{\sigma}, \mathbf{B}), \vec{\sigma}\right],$$

azaz, pl. a spin $x-$edik komponensének időbeli változása:

$$\frac{dS_x}{dt} = \frac{i\mu_B}{2}\left[(\vec{\sigma}, \mathbf{B}), \sigma_x\right] =$$

$$\frac{i\mu_B}{2}\Big((\sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z)\sigma_x - \sigma_x(\sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z)\Big) =$$

$$\frac{i\mu_B}{2}\left(-2i\sigma_z B_y + 2i\sigma_y B_z\right) = \mu_B\left(\sigma_z B_y - \sigma_y B_z\right) = \mu_B(\mathbf{B} \times \vec{\sigma})_x = (\mathbf{M}^S \times \mathbf{B})_x.$$

A mágneses tér tehát forgatónyomatékot gyakorol a spinhez társuló mágneses momentumra, s így a spint precesszálásra kényszeríti a mágneses tér iránya körül.