7. MOZGÁS ELEKTROMÁGNESES TÉRBEN

Ebben a fejezetben elektromágneses tér jelenléte esetén vizsgáljuk a részecske mozgását. Foglalkozunk mind az időben változó, mind az időben állandó elektromos és mágneses tér elektronra gyakorolt hatásával. Látni fogjuk, hogy a klasszikus elektrodinamikában csupán segédmennyiségnek tekintett $\Phi(\mathbf{r}, t)$ elektromos és $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ mágneses vektorpotenciál mérésekkel kimutatható (nemlokális) hatást gyakorol az elektronra.

7.1. IDŐFÜGGŐ PERTURBÁCIÓSZÁMÍTÁS.

Amennyiben egy atomot fénnyel besugárzunk, a foton elektromágneses tere erőhatást gyakorol a $-e$ töltésű elektronra. A mágneses erőhatás az alapállapotban lévő elektronra sokkal kisebb, mint az elektromos, ezért jó közelítésben a fénysugárzás hatását az elektromágneses tér

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_0 \sin \omega t$$

elektromos komponense okozza. Az elektronra gyakorolt erő és az ennek következtében keletkező potenciális energia egy $\mathbf{r}$ távolság megtétele után a következőképpen írható:

$$-\vec{\nabla}\, V = \mathbf{F} = -e\vec{\mathcal{E}}, \quad \to \quad V(\mathbf{r}, t) = \int_0^{\mathbf{r}} \mathbf{F} \mathrm{d}\mathbf{s} = \mathbf{F}\mathbf{r} = e\big(\mathcal{E}_{0x}x + \mathcal{E}_{0y}y + \mathcal{E}_{0z}z\big) \sin \omega t.$$

Az elektron energiájának operátora

$$H = H_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}, t),$$

ahol H_0 meghatározza az elektron $\varphi_i(\mathbf{r})$ stacionárius állapotait,

$$H_0(\mathbf{r})\varphi_i(\mathbf{r}) = E_i\varphi_i(\mathbf{r}),$$

amelyeket ismertnek tételezünk fel. Az elektromágneses tér okozta $V(t)$ potenciális energia időfüggő, ezért az

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \big[H_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}, t)\big]\Psi_i(\mathbf{r}, t)$$

állapotegyenlet nem szeparálható az $\mathbf{r}$ és t koordinátákban. (A továbbiakban az $\mathbf{r}-$függés explicit feltüntetésétől általában eltekintünk, mert r jelölést fogunk használni a futó állapotindex kvantumszámra.) Ez azt is jelenti, hogy egy $\Psi_i(t)$ állapot nem írható fel a $\varphi_i e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t}$ stacionárius alakban, energiája nem lesz örökké E_i. A $\Psi_i(t)$ állapot időbeli változásának ismeretére azonban mégis szükségünk van az atomszínképek és az intenzitásviszonyok megértéséhez.

A megoldást az időfüggő (Dirac-féle) perturbációszámítás segítségével kapjuk meg.

Mivel a $\varphi_r e^{-\frac{i}{\hbar}E_r t}$ stacionárius megoldások teljes rendszert képeznek, kifejthetjük szerintük a keresett $\Psi_i(t)$ állapotokat:

$$\Psi_i(t) = \sum_r c_{ri}(t)\varphi_r e^{-\frac{i}{\hbar}E_r t}, \tag{88}$$

ahol az állapot nem triviális időfüggését a kifejtési együtthatókra hárítottuk át. A megoldást a

$$\Psi_i(0) = \varphi_i$$

kezdeti feltétellel rögzítjük, ami a kifejtési együtthatókra a

$$c_{ri}(0) = \delta_{ri}, \quad r = 1, 2, ...$$

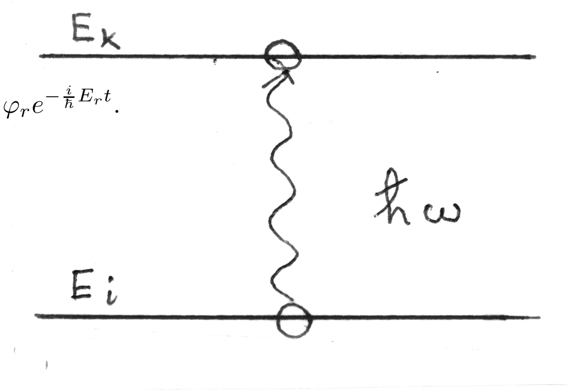
feltételt szolgáltatja.

A (88) alatti ansatz-ot behelyettesítve az állapotegyenletbe, nyerjük:

$$\sum_r i\hbar\left(\frac{\partial c_{ri}(t)}{\partial t} - \frac{i}{\hbar}E_r c_{ri}(t)\right)\varphi_r e^{-\frac{i}{\hbar}E_r t} = \sum_r c_{ri}(t)\big(E_r + V(t)\big)\varphi_r e^{-\frac{i}{\hbar}E_r t}.$$

Egyszerűsítve, valamint mindkét oldalt balról $\varphi_k^* \exp(iE_k t/\hbar)$ stacionárius állapotfüggvénnyel beszorozva és a térkoordinátákra kiintegrálva kapjuk a következő összefüggést:

$$\sum_r i\hbar\frac{\partial c_{ri}}{\partial t}\delta_{kr}e^{\frac{i}{\hbar}(E_k - E_r)t} = \sum_r c_{ri}\langle\varphi_k|V\varphi_r\rangle e^{\frac{i}{\hbar}(E_k - E_r)t}.$$



ábra. Fény által történő gerjesztés szemléltetése.

Bevezetve a $V_{kr} = \langle\varphi_k|V\varphi_r\rangle$ és $\omega_{kr} = (E_k - E_r)/\hbar$ jelöléseket és elvégezve a baloldali összegzést, kapjuk a kifejtési együtthatókat meghatározó

$$\frac{\mathrm{d}c_{ki}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\sum_r V_{kr}(t)c_{ri}e^{i\omega_{kr}t} \tag{89}$$

egyenletrendszert, amely ekvivalens az állapotegyenlettel. Az időfüggő perturbációszámítás alapját képező (89) alatti egyenletet integrálás után szukszcesszív approximációval oldhatjuk meg abban az esetben, ha a perturbáló $V(t)$ potenciál gyenge (azaz a $V_{kr}(t)$ matrix-elemek kicsik):

$$c_{ki}^{(n+1)}(t) = c_{ki}^{(n)}(0) + \frac{1}{i\hbar}\sum_r \int_0^t V_{kr}(\tau)e^{i\omega_{kr}\tau}c_{ri}^{(n)}(\tau)\mathrm{d}\tau. \tag{90}$$

Amennyiben a $V(t)$ perturbáció gyenge (azaz $V_{kr}t/\hbar << 1$), a rendszer egy ideig a kiinduló állapot közelében marad. Ezért nulladik közelítésben az átmeneti valószínűséget megadó kifejtési együtthatót a következőképpen vehetjük fel:

$$c_{ri}^{(0)}(t) = \delta_{ri}.$$

Ezt behelyettesítve a (90)-ik egyenlet jobb oldalába, az átmeneti amplitúdóra első rendben a következő kifejezést kapjuk:

$$c_{ki}^{(1)}(t) = \delta_{ki} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t V_{ki}(\tau)e^{i\omega_{ki}\tau}\mathrm{d}\tau.$$

Tehát annak valószínűsége (első rendben), hogy a $t = 0$ időpillanatban E_i energiával rendelkező állapotban levő rendszer t ideig tartó $V(t)$ perturbáció hatására átkerül az E_k energiájú állapotba, a következő ($i \neq k$):

$$W^{(1)}(i \to k) = \left|c_{ki}^{(1)}(t)\right|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t V_{ki}(\tau)e^{i\omega_{ki}\tau}\mathrm{d}\tau\right|^2. \tag{91}$$

Amennyiben $V_{ki} = 0$, az átmenet *elsőrendben tiltott.* Ilyenkor az átmenet valószínűségéről a másodrendű amplitúdó ad felvilágosítást:

$$c_{ki}^{(2)}(t) = \delta_{ki} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t V_{ki}(\tau)e^{i\omega_{ki}t}\mathrm{d}\tau + \frac{1}{(i\hbar)^2}\sum_r \int_0^t\int_0^\tau V_{kr}(\tau)V_{ri}(\tau')e^{i[\omega_{kr}\tau+\omega_{ri}\tau']}\mathrm{d}\tau'\mathrm{d}\tau,$$

amely első és második tagja $i \neq k$ esetén zérus, a harmadik tag pedig igen kicsi a kölcsönhatási matrixelem négyzetének megjelenése miatt.

7.2. INDUKÁLT ABSZORPCIÓ ÉS EMISSZIÓ.

Alkalmazási példaként kiszámítjuk a fény által okozott (indukált) abszorpció és emisszió valószínűségét az $(i \to k)$ átmenet esetén, első rendben. Az elektron-fény kölcsönhatás révén az elektron $x-$irányú elmozdulásakor $V(x,t) = e\mathcal{E}_{0x}x\sin\omega t$ (perturbációs) potenciális energiára tesz szert. (Hasonló meggondolások tehetők az $y-$ és $z-$irányú elmozdulások esetén.) Ezt beírva a (91) egyenletbe, kapjuk

$$\begin{aligned} W_x^{(1)}(i \to k) &= \frac{e^2\mathcal{E}_{0x}^2}{\hbar^2}|x_{ki}|^2\left|\int_0^t \sin\omega\tau e^{i\omega_{ki}\tau}\mathrm{d}\tau\right|^2 \\ &= \frac{e^2\mathcal{E}_{0x}^2}{\hbar^2}|x_{ki}|^2\left|\int_0^t \frac{1}{2i}\left(e^{i\omega\tau} - e^{-i\omega\tau}\right)e^{i\omega_{ki}\tau}\mathrm{d}\tau\right|^2 \\ &= \frac{e^2\mathcal{E}_{0x}^2}{\hbar^2}|x_{ki}|^2\left|\frac{1}{2(\omega+\omega_{ki})}\left(e^{i(\omega+\omega_{ki})t}-1\right) - \frac{1}{2(\omega_{ki}-\omega)}\left(e^{i(\omega_{ki}-\omega)t}-1\right)\right|^2. \end{aligned} \tag{92}$$

Az indukált emisszió és abszorpció valószínűsége tehát függ az $x_{ki} =< \varphi_k|x\varphi_i >= \int \mathrm{d}\mathbf{r}\varphi_k^*(\mathbf{r})x\varphi_i(\mathbf{r})$ matrixelemtől. Minthogy az elektron y és z irányban is mozoghat, átmenet az $i \to k$ állapotok között csak akkor jöhet létre, ha valamelyik az $x_{ik},\ y_{ik},\ z_{ik}$ koordináta átmeneti matrixelemek közül nem zérus. Ez *kiválasztási szabályok* megállapítását teszi lehetővé, amellyel később foglalkozunk.

Könnyen belátható, hogy a (92) alatti átmeneti valószínűség időtől függő része akkor vesz fel nagy értéket, ha a nevezők zérushoz közelítenek. Ebből a tényből kapjuk a Bohr által heurisztikusan bevezetet *frekvencia feltételek*et,

$$\omega_{ki} - \omega \approx 0 \quad \to \quad E_i + \hbar\omega \approx E_k$$

a fény *abszorpció,* és

$$\omega_{ki} + \omega \approx 0 \quad \to \quad E_i \approx E_k + \hbar\omega$$

az *indukált* fény *emisszió* jelenségére.

7.2.1. KIVÁLASZTÁSI SZABÁLYOK.

Mint az imént említettük, első rendben megengedett átmeneteket az jellemez, hogy legalább az egyik alábbi egyenlőtlenség teljesül:

$$x_{ki} \neq 0, \quad y_{ki} \neq 0, \quad z_{ki} \neq 0.$$

Először a harmonikus oszcillátor, majd a hidrogénatom esetét vizsgájuk.

a) A harmonikus oszcillátor kiválasztási szabályai.

Elegendő csak az x koordináta matrixelemét vizsgálni:

$$x_{n'n} = \langle \varphi_{n'} | x \, \varphi_n \rangle \neq 0,$$

ahol

$$\varphi_n = c_n \, e^{-\xi^2/2} u_n(\xi)$$

a harmonikus oszcillátor sajátfüggvényeit jelenti a korábban (ld. 3. fejezet) bevezetett jelölésekkel:

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad \omega = \sqrt{\frac{D}{m}}, \quad c_n = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{(1/4)} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}.$$

Az $u_n \equiv H_n$ Hermite-polinomra (a Schrödinger egyenlet megoldás során) megismertünk egy rekurziós összefüggést,

$$u_n''(\xi) - 2\xi u_n'(\xi) + 2n u_n(\xi) = 0.$$

Célszerű ezt átírni a következő formába:

$$u_{n+1} = 2\xi u_n - 2n u_{n-1},$$

amelyből az első két tag, $u_0 = 1$ és $u_1 = 2\xi$, ismeretében az összes Hermite-polinom leszármaztatható.

Ezen előkészítés után a matrixelemet könnyű kiszámolni:

$$x_{n'n} = \frac{c_{n'} c_n}{m\omega/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} u_{n'}(\xi) \, \xi \, u_n(\xi) e^{-\xi^2} \mathrm{d}\xi =$$

$$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{c_n}{c_{n+1}} \langle \varphi_{n'} | \varphi_{n+1} \rangle + n \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{c_n}{c_{n-1}} \langle \varphi_{n'} | \varphi_{n-1} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left[\sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{n',n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{n',n-1} \right].$$

A harmonius oszcillátorra vonatkozó kiválasztási szabály, mivel az $y_{n'n}$ és $z_{n'n}$ matrixelemekre is ugyanez az eredmény adódik,

$$n \to n \pm 1. \tag{93}$$

A harmonikus oszcillátor abszorpciós és emissziós színképe tehát *egyetlen* vonalat tartalmaz olyan ν frekvencián, amely pontosan megegyezik az oszcillátor klasszikus $\nu_0 = \omega/2\pi = \sqrt{\frac{D}{m}}/2\pi$ frekvenciájával:

$$\nu = \frac{E_{n+1} - E_n}{h} = \frac{E_n - E_{n-1}}{h} = \frac{\omega}{2\pi} = \nu_0.$$

A valóságban az ideális harmonikus oszcillátor eset csak közelítőleg valósul meg, ezért az oszcillátor (vibrációs) színkép mindig tartalmaz ν_0 mellett halványabb vonalakat is (anharmonikus oszcillátor).

b) A hidrogénatom kiválasztási szabályai.

Az $x\,,y\,,z$ operátorok átmeneti matrixelemeit most a

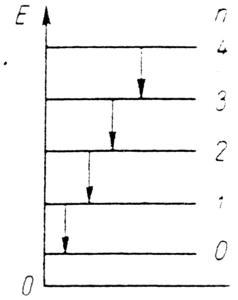
$$\varphi_{n\ell m} = \frac{1}{r} R_{n\ell}(r) Y_\ell^m(\vartheta, \phi)$$

hidrogénatom sajátfüggvények segítségével kell kiszámolni. Az $x = r \sin\vartheta \cos\phi$ irányú átmenet esetén például:

$$x_{n'\ell'm',n\ell m} = \langle \varphi_{n'\ell'm'} | x\, \varphi_{n\ell m} \rangle =$$

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r\, R_{n'\ell'}(r) R_{n\ell}(r) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_0^\pi \sin\vartheta \mathrm{d}\vartheta\, \sin\vartheta \cos\phi\, Y_{\ell'}^{m'*}(\vartheta,\phi)\, Y_\ell^m(\vartheta,\phi),$$

és hasonlóan a többi, az $y = r \sin\vartheta \sin\phi$, illetve a $z = r\cos\vartheta$ operátor átmeneti matrixelemeire vonatkozóan.



ábra. A harmonikus oszcillátor kiválasztási szabálya.

Mármost legkönnyebben a $\phi-$szerinti integrálás végezhető el, mivel a ϕ változó egyedül az Y_ℓ^m gömbfüggvény exponensében fordul elő. Ezért a $\phi-$szerinti integrálás az egyes matrixelemekhez a következő, $m-$re vonatkozó kiválasztási szabályokat rendeli:

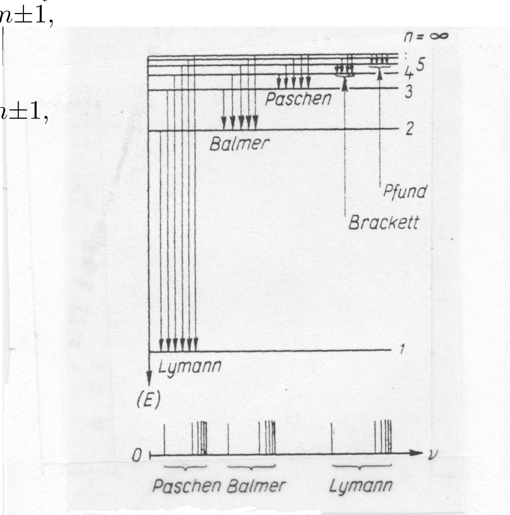
$$x_{n'\ell'm',n\ell m} \sim \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\phi} \cos\phi\, \mathrm{d}\phi \neq 0, \quad ha \quad m' = m \pm 1, \tag{94a}$$

$$y_{n'\ell'm',n\ell m} \sim \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\phi} \sin\phi\, \mathrm{d}\phi \neq 0, \quad ha \quad m' = m \pm 1,$$

$$z_{n'\ell'm',n\ell m} \sim \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\phi} \mathrm{d}\phi \neq 0, \quad ha \quad m' = m. \tag{94b}$$

A $\vartheta-$szerinti integrálás eredménye a mellékkvantumszámok közötti kiválasztási szabályhoz ad járulékot:

$$l \to l \pm 1, \tag{95}$$



ábra. A hidrogénatom kiválasztási szabályai.

amely kiszámításához fel kell használni a gömbfüggvények explicit alakját. Megjegyzendő, hogy ezen kiválasztási szabály elfogadása vezetett korábban a rotációs spektrum "null-vonal hiány" jelenségének megértéséhez, amely direkt kísérleti bizonyítékát szolgáltatta az $|L|^2 = \hbar^2\ell(\ell+1)$ képlet helyességének a Bohr féle $|L|^2 = \hbar^2\ell^2$ posztulátummal szemben. A fenti kiválasztási szabály tehát önmagában a *rotációs spektrum kiválasztási szabályát* is jelenti egyúttal.

Végül könnyen belátható az is, hogy az $r-$szerinti integrálás a főkvantumszámok változásában semmiféle korlátozáshoz nem vezet, azaz tetszőleges

$$n' \to n = 0, 1, \dots \tag{96}$$

átmenet lehetséges a főkvantumszámokat tekintve.

7.3. ÁTMENETI VALÓSZÍNŰSÉG IDŐBEN ÁLLANDÓ PERTURBÁCIÓ ESETÉN. FERMI ARANYSZABÁLYA.

Az eddigiekben a periódikus potenciálok esetét tárgyaltuk. Láttuk, hogy egy $V(t) \approx \sin\omega t$ potenciál (a fény elektromos potenciálja) által okozott indukált abszorpció és emisszió jelenségét miként érthetjük meg az elsőrendű perturbációszámítás segítségével.

Most az elsőrendű, időfüggő perturbációszámítás egy másik alkalmazásával fogunk foglalkozni, nevezetesen avval az esettel, amikor a potenciál (időben) *állandó* egy bizonyos $t_0 = 0$ időpillanattól kezdve. Ilyen esettel találkozunk például az elektron-atommag szóródásnál, vagy a radioaktív bomlásoknál, pl. egy alfa-részecske atommagból való kilökődése esetén. Ilyenkor az esemény bekövetkezte előtt egy (időben) állandó potenciálú állapot uralkodik, majd az esemény lezajlása után, az állapotváltozás miatt, egy másik, (időben) állandó potenciálú állapotba kerül a végállapotú rendszer. A spontán emisszió is egy ilyen, egy időpontban bekapcsolt, időfüggetlen potenciál esetével tárgyalható.

Tekintsük az elsőrendű időfüggő perturbációszámítás valószínűségi alapképletét:

$$W^{(1)}(i \to k) = |c_{ki}^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t V_{ki}(\tau)e^{i\omega_{ki}\tau}\mathrm{d}\tau\right|^2,$$

ahol $\omega_{ki} = (E_k - E_i)/\hbar$ $(i \neq k)$ a kezdeti és végállapoti energiák közti különbséggel kapcsolatos.

Amennyiben $V(t)-$t egy lépcsőfüggvénnyel írhatjuk le,

$$V(t) = \tilde{V}\,\Theta(t), \qquad \Theta(t) = \begin{cases} 0, & \text{ha} \quad t < 0 \\ 1, & \text{ha} \quad t \geq 0 \end{cases},$$

ahol $\tilde{V} = \tilde{V}(\mathbf{r})$, azaz a potenciál csak időben állandó, de hellyel még változhat, akkor az átmeneti valószínűségre első rendben a következő összefüggést kapjuk:

$$W^{(1)}_{(i\to k)}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\,|V_{ki}|^2\left|\frac{e^{i\omega_{ki}t}-1}{i\omega_{ki}}\right|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\,|V_{ki}|^2\frac{\sin^2(\omega_{ki}/2)t}{(\omega_{ki}/2)^2}\,\frac{\pi\,t}{\pi\,t}$$

$$= \frac{\pi\,t}{\hbar^2}\,|V_{ki}|^2\; f_t(\omega_{ki}/2),$$

ahol bevezettük a következő jelöléseket:

$$V_{ki} \equiv < \varphi_k|\tilde{V}(r)\varphi_i >, \quad f_t(\alpha) = \frac{\sin^2\alpha t}{\pi\alpha^2 t},$$

és

$$\alpha = \omega_{ki}/2.$$

Mármost könnyen bizonyítható, hogy

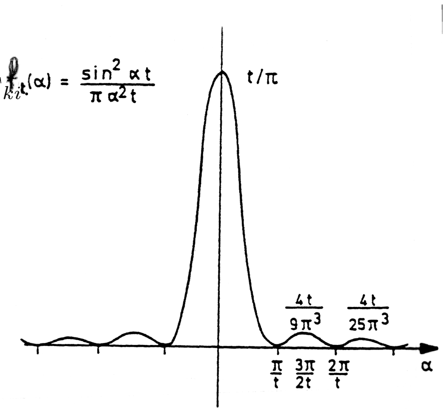
$$\lim_{t\to\infty} f_t(\alpha) = \delta(\alpha),$$

azaz

$$\lim_{t\to\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\alpha f_t(\alpha) F(\alpha) = F(0).$$

$t \to \infty$ esetén tehát (azaz, ha a hatás ∞ ideig tart) az időegységre eső átmeneti valószínűség

$$\lim_{t\to\infty} \frac{W^{(1)}_{(i\to k)}(t)}{t} = \frac{\pi}{\hbar^2} |V_{ki}|^2 \, \delta(\omega_{ki}/2) = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ki}|^2 \, \delta(E_k - E_i) \equiv \Gamma_{ki}$$



ábra. Az $f_t(\omega_{ki}/2)$ függvény viselkedése.

(a $\delta-$függvény megjelenése az energiamegmaradást fejezi ki.)

Az $f_t(\omega_{ki}/2)$ függvény vizsgálatából felvilágosítást kaphatunk arról, hogy egy *véges* ideig tartó kölcsönhatás mekkora változást okozhat a rendszer energiájában. Tartson a perturbáció $t \approx \delta t$ ideig. A 45. ábrából leolvashatjuk, hogy az f_t függvény $\omega_{ki}/2 \approx 0$ helyen veszi fel legnagyobb értékét, ezért $\omega_{ik} \approx 0$, azaz első rendben, véges ideig tartó állandó perturbáció hatására csak közelítőleg őrződik az energia: $E_i \approx E_k$. Az energia megváltozása $\delta\omega_{ki}/2 \sim \pi/t = \pi/\delta t$ lehet, ami az átmeneti valószínűségfüggvény maximuma és első minumuma (zérushelye) közti távolság. Azaz $\delta\omega_{ki} \sim 2\pi/\delta t$, ami azt mutatja, hogy az E_i kezdeti energiától nem valószínű nagyobb eltérés, mint

$$\delta E \sim \frac{2\pi\hbar}{\delta t},$$

amely összhangban van a Heisenberg-féle határozatlansági reláció

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{2\Delta t}$$

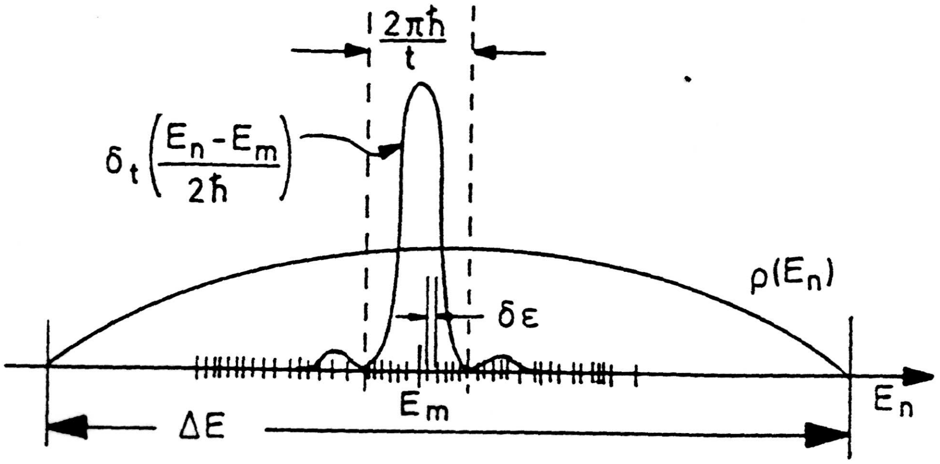
képletével.

Ha nem egy élesen meghatározott "k" végállapot érdekel bennünket, hanem egy "k" körüli tartomány, akkor a valószínűségeket össze kell adnunk (folytonos állapoteloszlás esetén pedig integrálnunk):

$$P_{i\to\sum k} = \sum_k \Gamma_{ki} = \int \mathrm{d}E_k \rho(E_k)\Gamma_{ki} = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{ki}|^2 \int \mathrm{d}E_k \delta(E_k - E_i)\rho(E_k),$$

ami kiintegrálás után adja Fermi aranyszabályát:

$$P_{i\to\sum k} = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{ki}|^2 \rho(E_i). \tag{98}$$



Fermi aranyszabálya folytonos eloszlás esetén.

7.4. TÖLTÖTT RÉSZECSKE HAMILTON OPERÁTORA ELEKTROMÁGNESES TÉR JELENLÉTE ESETÉN

Megalkotjuk az energia operátorát $\vec{\mathcal{E}}$ elektromos és $\mathbf{B}$ mágneses tér esetén, amelyek a $\Phi(\mathbf{r}, t)$ skalár és $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ vektor potenciálból az ismert módon származtathatók le:

$$\vec{\mathcal{E}} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \vec{\nabla}\Phi, \qquad \mathbf{B} = \vec{\nabla} \times \mathbf{A}.$$

Egy $q = \pm e$ töltésű és m tömegű részecske mozgásegyenlete elektromágneses térben

$$m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F} = q(\vec{\mathcal{E}} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}),$$

amely az elektrodinamikából ismeretes

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2 + q\Phi(\mathbf{r}, t)$$

Hamilton függvényből származtatható le. Ebből akkor kapunk Hamilton *operátor*t, ha $\mathbf{p}$-t és $\mathbf{r}$-t a megfelelő operátorokkal helyettesítjük:

$$H = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)\right)^2 + q\Phi(\mathbf{r}, t). \tag{99}$$

Az első tag, azaz a kinetikus energiaoperátor kiértékelésénél a négyzetre emeléskor előfordul a következő két tag,

$$\vec{\nabla}\mathbf{A} + \mathbf{A}\vec{\nabla} = (\vec{\nabla}\mathbf{A}) + 2\mathbf{A}\vec{\nabla} = 2\mathbf{A}\vec{\nabla} \equiv 2(\mathbf{A}, \vec{\nabla}),$$

amelynek továbbalakításakor kihasználtuk, hogy *Coulomb mértékben* fogunk dolgozni a továbbiakban: $(\vec{\nabla}\mathbf{A}) = 0$.

Így a részecske mozgását a következő Schrödinger egyenlet fogja leírni:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r},t) + \frac{i\hbar q}{m}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\vec{\nabla}\Psi(\mathbf{r},t) + \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}^2(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t) + q\Phi(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t). \tag{100}$$

7.4.1. ÁLLANDÓ MÁGNESES TÉR ESETE.

Vizsgáljuk most meg a részecske mozgását térben és időben állandó,

$$\mathbf{B} \neq \mathbf{B}(\mathbf{r},t), \qquad \mathbf{B} = áll.$$

mágneses tér esetén. Mindenek előtt bizonyítjuk, hogy a

$$\mathbf{B} = \vec{\nabla}\times\mathbf{A} = áll.$$

összefüggés kielégül, ha a vektorpotenciál előállítható az

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B}\times\mathbf{r}$$

formában.

Bizonyítás:

$$B_i = (\vec{\nabla}\times\mathbf{A})_i = \frac{1}{2}(\vec{\nabla}\times(\mathbf{B}\times\mathbf{r}))_i = \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\partial_j(\mathbf{B}\times\mathbf{r})_k =$$
$$= \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\partial_j\epsilon_{kst}B_s r_t = \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\epsilon_{kst}B_s\delta_{jt} = \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\epsilon_{ksj}B_s =$$
$$\frac{1}{2}(1\cdot 1\cdot B_i + (-1)(-1)B_i) = B_i,\ (QED).$$

(A fenti bizonyításnál az Einstein konvenciót használtuk: összegzés volt értendő minden kétszer előforduló indexre; az utolsó átalakításnál az s, j és $k-$ra vonatkozó összegzést végeztük el, amelynél s nyilván csak i lehet, míg j felveheti k értékét, de ekkor k kötelezően j kell legyen az

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & i,j,k = \ \ ciklikusanpáros, \\ -1 & i,j,k = \ \ ciklikusanpáratlan, \\ 0 & \qquad\qquad egyébként. \end{cases}$$

antiszimmetrikus tenzor definíciós tulajdonsága miatt.)

A (100) alatti Schrödinger egyenlet jobboldalának második tagjában szereplő operátort ezért állandó $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$ mágneses tér esetén a következőképpen írhatjuk $(q = -e)$:

$$\frac{i\hbar q}{m}(\mathbf{A},\vec{\nabla}) = \frac{1}{2}\frac{i\hbar q}{m}(\mathbf{B}\times\mathbf{r},\vec{\nabla}) = \frac{1}{2}\frac{i\hbar q}{m}(\mathbf{r}\times\vec{\nabla},\mathbf{B}) = \frac{-q}{2m}(\mathbf{L},\mathbf{B})$$
$$= -\frac{q}{2m}(L_zB_z) = +\frac{e\hbar}{2m}\frac{1}{\hbar}(L_zB_z) = +\mu_B\frac{1}{\hbar}(L_zB_z) = -(\mathbf{M}^L,\mathbf{B}) = V^L_{magn}.$$

Tehát ez a második tag (a Zeeman effektusnál már korábban mesterségesen bevezetett, a Schrödinger energiaoperátorhoz egyszerűen hozzáírt) *mágneses potenciális energiá*ról ad számot. Pauli-féle *paramágneses* tagnak hívjuk a továbbiakban.

A harmadik tag operátorának kiértékeléséhez a következő átalakításokat végezzük el:

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

Ezt a harmadik tagot Landau-féle *diamágneses* tagnak hívjuk.

A továbbiakban belátjuk, hogy a diamágneses tag elhanyagolható a paramágneses tag jelenléte esetén ($q = -e$):

$$\frac{dia}{para} = \frac{| < 3.tag > |}{| < 2.tag > |} = \frac{\frac{e^2}{8m} < x^2 + y^2 > B_z^2}{\frac{e}{2m} < L_z > B_z} =$$

$$\frac{e}{4} \frac{< x^2 + y^2 >}{< L_z >} B_z = \frac{e a_0^2}{4\hbar} B_z = 1.1 \times 10^{-6} B_z / Tesla$$

$$= \frac{1}{4} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{c B_z}{e/a_0^2} = \frac{1}{137} \cdot \frac{mágneses\, tér}{elektromos\, tér}$$

Mármost, mivel földi körülmények között még laboratóriumban is $B_z \leq 10^5 G = 10 Tesla$, ezért az A^2-es 3. tag elhagyható abban az esetben, ha a 2. tag nem zérus($< L_z > \neq 0$). A diamágnességet leíró 3. tag pl. csak egyes fémekben és szabad elektrongáz esetén, vagy a neutron csillagok felületén válik összemérhetővé a paramágnesességet leíró 2. taggal.

Vizsgáljuk most meg a paramágneses (2.) tag viszonyát az utolsó, az elektromos potenciál taghoz képest ($q = -e$).

$$\frac{param.}{elektromos} = \frac{(-q/2m) < L_z > B_z}{< q\Phi >} \approx \frac{(e/2m)\, \hbar B_z}{e^2/a_0} = \frac{a_0 \hbar}{2me} B_z =$$

$$= \frac{a_0^2 \hbar}{2me} \frac{1}{a_0} B_z = \frac{a_0^2 \hbar}{2me} \frac{me^2}{\hbar^2} \frac{\hbar c}{e^2} \alpha B_z = \frac{a_0^2 \alpha}{2e}\, c\, B_z = 2 \times 10^{-6} B_z\, (Tesla),$$

ami azt jelenti, hogy laboratóriumi mágneses térerősségek mellett a nívók energiája csak kicsit változik.

7.4.2. A HIDROGÉNATOM ENERGIANÍVÓINAK ELTOLÓDÁSA HOMOGÉN ÁLLANDÓ MÁGNESES TÉR HATÁSÁRA.

Csak a 2. tagot megtartva a (100) alatti Schrödinger egyenlet szeparálás után a következő alakú lesz

$$H\psi_{nlm_l} = \left(H_0 - \frac{q}{2m_e} B_z L_z \right) \psi_{nlm_l} = E_{nlm_l} \psi_{nlm_l},$$

ahol

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - k\frac{e^2}{r},$$

s így az energiasajátérték:

$$E_{nlm_l} = \frac{E_1}{n^2} - \frac{q\hbar}{2m_e} B_z\, m_l = \frac{E_1}{n^2} + \hbar \omega_L m_l,$$

ahol bevezettük az

$$\omega_l = -\frac{q\hbar}{2m_e} B_z = \frac{e\hbar}{2m_e} B_z$$

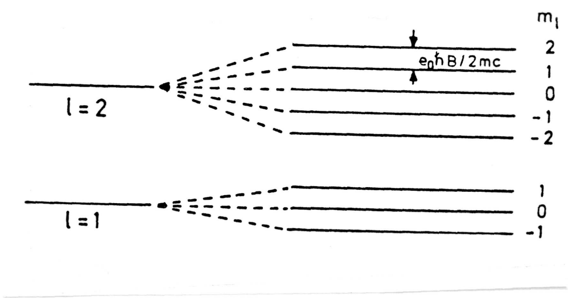
mennyiséget a Larmour körfrekvencia jelölésére. Az m_l kvantumszám megjelenése miatt minden l mellékkvantumszámú állapot $(2l+1)-$szeresen felhasad (47. ábra). A felhasadás mértéke független az $l-$től, viszont arányos a B_z mágneses térerősséggel, s az arányossági tényező éppen egy Bohr magneton: $\mu_B = e\hbar/2m_e$. B_z-t Tesla-ban mérve $\omega_L = \frac{e\hbar}{2m_e}B_z = 13.6$ eV $(4\times10^{-14}B_z$ [T]). A jelenséget *közönséges Zeemann-effektus*nak hívjuk és korábban a spin tárgyalásakor találkoztunk vele (4. fejezet).

További megjegyzések. A (100) alatti Schrödinger egyenlet energiaoperátora állandó $\mathbf{B}$ esetén a következő alakú:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{q}{2m_e}(\mathbf{L},\mathbf{B}) + \frac{q^2B_z^2}{8m_e}(x^2+y^2) + q\Phi(\mathbf{r},t), \tag{101}$$

ahol a 2. tag a paramágneses, a 3. tag a diamágneses energiához ad járulékot. A mágneses momentum az a vektormennyiség, amely az energiaoperátor $\mathbf{B}$ szerinti parciális deriváltjaként áll elő,

$$\vec{\mu} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{B}}.$$



47. Ábra. A közönséges Zeemann effektus szemléltetése.

Így a paramágneses 2. tag járuléka állandó mágneses tér esetén a

$$\vec{\mu} \equiv -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{B}} = \frac{q}{2m_e}\mathbf{L} = -\mu_B\frac{1}{\hbar}\mathbf{L}$$

operátor várható értéke:

$$< \vec{\mu} >= -\mu_B < L > /\hbar,$$

ahol a Bohr magneton=$\mu_B = e\hbar/2m_e = 9.27\times10^{-24}$ J/T. (A spint most elhanyagoljuk.) Ha ez a tag zérus (gömbszimmetrikus állapotok esete), akkor vehető észre a diamágneses energiát jelentő 3. tag, amely átlagosan

$$< \vec{\mu} >= -\frac{q^2\mathbf{B}}{4m_e} < x^2+y^2 > \approx -\frac{q^2\mathbf{B}}{6m_e}a_0^2$$

mágneses momentumot képvisel, amely az indukáló $\mathbf{B}$ mágneses térrel arányos (és azzal ellentétes irányú).

7.5. KINETIKUS ÉS KANONIKUS IMPULZUS FELCSERÉLÉSI RELÁCIÓI

A továbbiakban *kanonikus* impulzusnak nevezzük az eddig megismert $\mathbf{p}$ impulzus operátort, amely a koordináta operátorral a jól ismert felcserélési relációkat elégíti ki:

$$[p_i, x_j] = \tfrac{\hbar}{i}\delta_{ij}, \quad \text{miközben } [x_i, x_j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0.$$

Tehát a kanonikus impulzus komponensei egymással felcserélhetők, azok egyidejűleg elvben mérhetők.

Kinetikus impulzusnak nevezzük a továbbiakban a

$$\mathbf{K} = \mathbf{p} - q\mathbf{A}$$

mennyiséget. Vektorpotenciál nélküli térrészben tehát a kinetikus impulzus megegyezik a kanonikus impulzussal.

A kinetikus impulzus felcserélési szabályai a következők:

$$[K_i, x_j] = \tfrac{\hbar}{i}\delta_{ij} \quad \text{és} \quad [K_i, K_j] = -\tfrac{\hbar}{i}q\varepsilon_{ijk}B_k.$$

Tehát a kinetikus impulzus komponensei mágneses tér jelenléte esetén nem cserélhetők fel egymással. Ennek messzeható következményei lesznek (ld. Landau-nívók).

7.6. A HULLÁMFÜGGVÉNY VÁLTOZÁSA MÉRTÉKTRANSZFORMÁCIÓ HATÁSÁRA

Az elektromágneses térben mozgó q töltésű, m tömegű részecskére ható (Lorentz) erő,

$$m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F} = q\big(\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B} + \vec{\mathcal{E}}\big),$$

$\mathbf{B}$-től és $\vec{\mathcal{E}}$-től függ, a Schrödinger egyenlet viszont a mértéktranszformáció erejéig meghatározott $\mathbf{A}$ vektorpotenciáltól és Φ skalárpotenciáltól. Minthogy ezek a klasszikus elektrodinamikában csak segédmennyiségként szerepelnek, felmerül a kérdés, vajon maga a hullámfüggvény, $\Psi(\mathbf{r}, t)$, függ-e a mértéktranszformációktól? Továbbá: vajon a töltött részecskék mozgása csupán csak $\mathbf{B}$-re és $\vec{\mathcal{E}}$-re, vagy $\mathbf{A}$-ra és $\Phi-$re is érzékeny-e?

Mint ismeretes, az

$$\vec{\mathcal{E}} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \vec{\nabla}\Phi, \qquad \mathbf{B} = \vec{\nabla} \times \mathbf{A}$$

Maxwell egyenleteket invariánsan hagyó

$$\mathbf{A} \to \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \vec{\nabla}\Lambda(\mathbf{r},t), \qquad \Phi \to \Phi' = \Phi - \frac{\partial}{\partial t}\Lambda(\mathbf{r},t)$$

potenciál-transzformációkat *mértéktanszformációnak* nevezzük, ahol $\Lambda(\mathbf{r},t)$ egy tetszőleges skalár függvényt jelöl.

Megmutatjuk, hogy a baloldali (vesszőtlen) potenciálokhoz tartozó

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right)^2 + q\Phi(\mathbf{r},t)\right]\Psi(\mathbf{r},t) \tag{102}$$

Schrödinger egyenlet $\Psi(\mathbf{r},t)$ megoldása és a jobboldali (vesszős, mérték-transzformált) potenciálokhoz tartozó

$$i\hbar\frac{\partial\Psi'(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}'(\mathbf{r},t)\right)^2 + q\Phi'(\mathbf{r},t)\right]\Psi'(\mathbf{r},t) \tag{102'}$$

Schrödinger egyenlet $\Psi'(\mathbf{r},t)$ megoldása közötti összefüggés a következő:

$$\Psi'(\mathbf{r},t) = e^{\frac{i}{\hbar}q\,\Lambda(\mathbf{r},t)}\Psi(\mathbf{r},t).$$

Bizonyítás: Felhasználjuk a következő azonosságot, amely egy tetszőleges $f(\mathbf{r},t)$ differenciálható függvényre vontakozik:

$$e^{f(\mathbf{r},t)}\vec{\nabla} = (\vec{\nabla} - (\vec{\nabla}f))e^{f(\mathbf{r},t)}$$

és

$$e^{f(\mathbf{r},t)}\frac{\partial}{\partial t} = (\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial f}{\partial t})e^{f(\mathbf{r},t)}\left(= e^f\frac{\partial f}{\partial t} + e^f\frac{\partial}{\partial t} - (\frac{\partial f}{\partial t})e^f\right),$$

és beszorozzuk a (102) alatti Schrödinger egyenletet balról $e^{\frac{i}{\hbar}q\Lambda(\mathbf{r},t)}$–vel:

$$\left[\frac{1}{2m}e^{\frac{i}{\hbar}q\Lambda(\mathbf{r},t)}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right)\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right) + e^{\frac{i}{\hbar}q\Lambda(\mathbf{r},t)}q\Phi(\mathbf{r},t)\right]\Psi(\mathbf{r},t)$$

$$= i\hbar e^{\frac{i}{\hbar}q\Lambda(\mathbf{r},t)}\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t},$$

ami, felhasználva az előbbi azonosságot, a következőképpen írható tovább:

$$\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - q\mathbf{A}(\mathbf{r},t) - \frac{\hbar}{i}\frac{i}{\hbar}q(\vec{\nabla}\Lambda)\right)^2 + q\Phi(\mathbf{r},t)\right]e^{\frac{i}{\hbar}q\Lambda(\mathbf{r},t)}\Psi(\mathbf{r},t)$$

$$= i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{i}{\hbar}q\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\right)e^{\frac{i}{\hbar}q\Lambda(\mathbf{r},t)}\Psi(\mathbf{r},t),$$

azaz

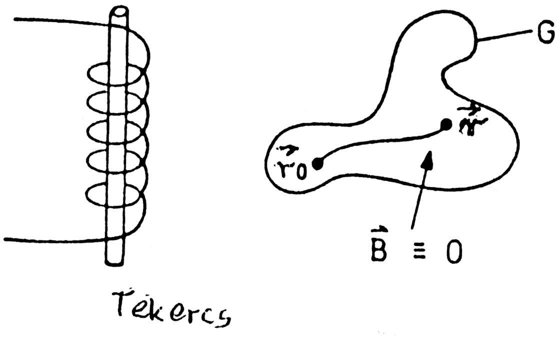
$$\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - q\mathbf{A}'(\mathbf{r},t)\right)^2 + q\Phi'(\mathbf{r},t)\right]\Psi'(\mathbf{r},t) = i\hbar\frac{\partial\Psi'(\mathbf{r},t)}{\partial t}$$

Q.E.D

7.7. AHARONOV-BOHM (AB) EFFEKTUS (1959)

Tekintsük az elektron ($q = -e$) mozgását egy időben állandó mágneses tér [$\mathbf{B} \neq \mathbf{B}(t)$] jelenléte esetén.

Elképzelhető olyan térrész, amelyben $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \equiv \mathrm{rot}\mathbf{A} = 0$. Egy ilyen térrészben vettük fel a 48. ábra G görbéjét. Ebben a térrészben $\mathbf{B} \equiv 0$, amiből $\mathbf{A} = \vec{\nabla}\Lambda(\mathbf{r})$ következik, ebből pedig $\Lambda(\mathbf{r}) = \int_{r_0}^{r} \mathrm{d}\mathbf{s}\mathbf{A}(\mathbf{s})$. Azaz $\Lambda \neq \Lambda(t)$, $\Phi' = \Phi$.



48. ábra. A G görbe a $B \equiv 0$ térrészben.

Abban a térrészben, ahol $\mathbf{B} \equiv 0$, maga az $\mathbf{A}$ vektorpotenciál nem szükségképpen zérus, s így a hullámfüggvényt vagy a ($V = q\Phi$)

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - q\mathbf{A}\right)^2 \Psi + V\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi \qquad (103)$$

$\mathbf{A} \neq 0$ esetre vonatkozó Schrödinger egyenletből, vagy a mértéktranszformált s így vektorpotenciál nélküli Schrödinger egyenletből ($V = q\Phi' = q\Phi$)

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)^2 \Psi' + V\Psi' = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi' \qquad (103')$$

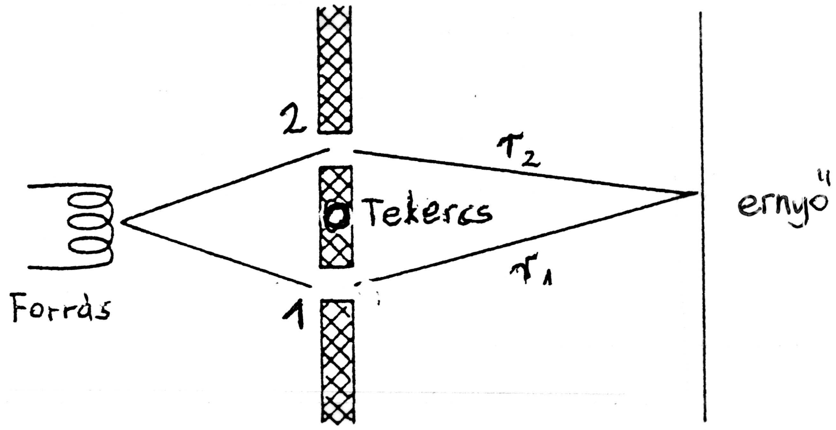
kaphatjuk meg, ahol $\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla(-\Lambda) = 0$. Ez utóbbi egyenlet nyilván akkor is érvényes, amikor $\mathbf{B} \equiv 0$ mindenütt, ezért a (103') egyenletből nyert Ψ'−t a mágneses tér nélküli hullámfüggvénynek fogjuk hívni és Ψ_0−lal jelöljük. Ugyanakkor a (103)-as egyenletből adódó Ψ−t a $\mathbf{B} \neq 0$ mindenütt miatt Ψ_B−vel fogjuk jelölni. A két hullámfüggvény közti összefüggés az előzőek szerint:

$$\Psi_0 = e^{\frac{i}{\hbar}q(-\Lambda)}\Psi_B,$$

azaz

$$\Psi_B = \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}q\int_{r_0}^{r}\mathrm{d}\mathbf{s}\mathbf{A}(\mathbf{s})}.$$

Annak eldöntésére, hogy az elektron vajon az $\mathbf{A}$ vektorpotenciált, vagy az erőhatással kapcsolatos $\mathbf{B}$ mágneses teret "érzékeli-e", Aharonov és Bohm a következő kísérlet elvégzését javasolta (49. ábra).



49. ábra. Az Aharonov-Bohm interferenciakísérlet szemléltetése felülnézeti metszetben.

Egy elektronforrásból származó koherens elektronsugár-nyalábot két résen vezetnek keresztül. A réseken az elektronok diffraktálódnak, és interferencia képet hoznak létre a felfogóernyő különböző részein (ld. 1. fejezet). A két rés közötti, elektronok számára áthatolhatatlan részen egy szolenoidot helyeznek el, amelyben tetszés szerint tudják változtatni a mágneses teret. Jóllehet az elektronok mindvégig $\mathbf{B} \equiv 0$ (erőmentes) térrészben mozognak, az ernyőn észlelt interferenciakép $\mathbf{B}$ vátoztatásával változik. A jelenséget a következőképpen értelmezhetjük.

Tegyük fel, hogy a 2. rés zárva van. Ekkor az elektron hullámfüggvénye

$$\Psi_{1B}(\mathbf{r}) = \Psi_{10}(\mathbf{r})\, e^{\frac{i}{\hbar} q \int_1 \mathrm{d}\mathbf{s}\mathbf{A}(\mathbf{s})},$$

ahol $\Psi_{10}(\mathbf{r})$ jelenti a $\mathbf{B} = 0$ esetén érvényes hullámfüggvényt, az exponensben szereplő vonalintegrál útja pedig az 1. résen áthalad. Amikor az 1. rés van zárva, a hullámfüggvény

$$\Psi_{2B}(\mathbf{r}) = \Psi_{20}(\mathbf{r})\, e^{\frac{i}{\hbar} q \int_2 \mathrm{d}\mathbf{s}\mathbf{A}(\mathbf{s})},$$

alakban írható. Amennyiben mindkét rés nyitva van, a megoldás az előző két hullámfüggvény szuperpozíciója:

$$\Psi_B(\mathbf{r}) = \Psi_{1B} + \Psi_{2B} = \Psi_{10}(\mathbf{r})\, e^{\frac{i}{\hbar} q \int_1 \mathrm{d}\mathbf{s}\mathbf{A}(\mathbf{s})} + \Psi_{20}(\mathbf{r})\, e^{\frac{i}{\hbar} q \int_2 \mathrm{d}\mathbf{s}\mathbf{A}(\mathbf{s})} =$$

$$\left(\Psi_{10}(\mathbf{r})\, e^{\frac{i}{\hbar} q \left[\int_1 \mathrm{d}\mathbf{s}\mathbf{A}(\mathbf{s}) - \int_2 \mathrm{d}\mathbf{s}\mathbf{A}(\mathbf{s})\right]} + \Psi_{20}(\mathbf{r})\right) e^{\frac{i}{\hbar} q \int_2 \mathrm{d}\mathbf{s}\mathbf{A}(\mathbf{s})}.$$

Az exponens szögletes zárójelében álló kifejezés viszont a mágneses fluxus, ugyanis

$$\int_1 \mathrm{d}\mathbf{s}\mathbf{A}(\mathbf{s}) - \int_2 \mathrm{d}\mathbf{s}\mathbf{A}(\mathbf{s}) = \oint \mathrm{d}\mathbf{s}\mathbf{A} = \int \mathrm{d}\mathbf{f}(\vec{\nabla} \times \mathbf{A}) = \int \mathrm{d}\mathbf{f}\,\mathbf{B} = \Phi_B.$$

Jóllehet az elektron mindvégig a $\mathbf{B} = 0$, azaz mágneses tér nélküli térben mozog, mégis, a kísérlet szerint, Φ_B változtatása interferenciakép változást okoz. Ezt a jelenséget nevezzük AB effektusnak.

Fizikai magyarázata az, hogy az $\vec{\mathcal{E}}$ és $\mathbf{B}$ lokális hatásán kívül létezik még az $\mathbf{A}$ (és Φ) potenciál(ok)nak is egy kvantummechanikai, nemlokális hatása, ami akkor lép fel, ha $\Phi_B \neq n2\pi\frac{\hbar}{q}$. Úgy is fogalmazhatunk, hogy nem az $\vec{\mathcal{E}}$ és $\mathbf{B}$ klasszikus fizikai mennyiségek az elsődlegesek, hanem az $\mathbf{A}$ és $\Phi(\mathbf{r},t)$ potenciálok. (Geometriai magyarázata az, hogy az elektron számára megengedett tértartomány nem egyszeresen összefüggő.)

Határozzuk meg az interferencia maximumok és minimumok helyét. Az AB kísérlet elrendezése hengerszimmetrikus. Hengerszimmetrikus térben a szimmetriatengelyre merőleges szabad mozgást $\Psi \sim \exp(ikr)/\sqrt{r}$ hullámfüggvény írja le. Számunkra az exponensben álló (ismerős) ikr kifejezés a fontos most. A teljes relatív fázis (a két hullám fáziskülönbsége) az ernyőnél

$$\Psi_B(r_1, r_2 \to \infty) \sim e^{i(kr_1 + \frac{q}{\hbar}\Phi_B - kr_2)} \times X,$$

ahol X egy $r_1 - r_2-$től nem függő, egységnyi abszolútértékű fázisfaktort jelöl, és r_i jelenti az $i-$dik rés és az ernyőn való becsapódás közti távolságot ($r_i = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}|$). Konstruktív interferenciát kapunk, ha a fáziskülönbség $n \times 2\pi$:

$$kr_1 + \frac{q}{\hbar}\Phi_B - kr_2 = 2\pi n, \qquad n = 1, 2, 3, ...,$$

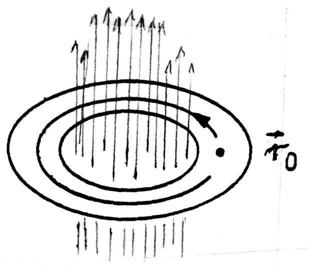
azaz, ha az útkülönbség

$$r_1 - r_2 = \frac{\lambda}{2\pi}\left(2\pi n - \frac{q\Phi_B}{\hbar}\right) = \lambda\left(n + \frac{\Phi_B}{h/e}\right).$$

(Az utolsó átalakításnál a $q = -e$ és $h = 2\pi\hbar$ helyettesítést alkalmaztuk.)

Látjuk tehát, hogy létezik egy karakterisztikus elemi mágneses fluxus $\Phi_{B0} = h/e = 4.135 \times 10^{-11}$ [T cm^2], amely kapcsolatban áll az interferenciakép maximumainak kialakulásával.

7.8. FLUXUSKVANTÁLÁS SZUPRAVEZETŐKBEN



50. ábra. Fluxuskvantálás szupravezető gyűrűben

T_c kritikus hőmérséklet alatt fémek, félvezető oxidok, kerámiák szupravezetővé válnak, azaz az elektronok Cooper-párokba rendeződve ellenállásmentesen haladnak bennük. A Meissner-effektus szerint az elsőfajú szupravezetőkből kiszorul a $\mathbf{B}$ mágneses tér. A Cooper-párok tehát mágneses tér mentes térrészben mozognak, állapotukat a $\psi_0(\mathbf{r})$ hullámfüggvény írja le.

Jelölje tehát egy tetszőleges $\mathbf{r}$ pontban $\psi_0(\mathbf{r})$ az elektronok külső mágneses tér nélkül kapott hullámfüggvényét, $\psi_B(\mathbf{r})$ pedig a $\mathbf{B}$ mágneses tér jelenléte esetén érvényes hullámfüggvényt. A két hullámfüggvény között az előzőek szerint csak egy, az $\mathbf{A}$ vektorpotenciállal kapcsolatos, egységnyi abszolútértékű fázisfaktor a különbség ($q = -2e$ a Cooper-párok miatt):

$$\Psi_B(\mathbf{r}) = \Psi_0(\mathbf{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}2e\int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathrm{d}\mathbf{s}\mathbf{A}(\mathbf{s})},$$

ahol $\mathbf{r}_0$–at a szupravezető gyűrű belsejében vettük fel. Ezen $\mathbf{r}_0$ pontból kiindulva, mindvégig a gyűrűben haladva, körbevihetjük zárt görbe mentén az $\mathbf{r}$ végpontot, hogy újra a kiindulási $\mathbf{r}_0$ ponthoz érjünk. Így a szupravezető gyűrűben (ld. 50. ábra): érvényesnek kell lennie a következő egyenlőségnek:

$$\Psi_B(\mathbf{r}_0) = \Psi_0(\mathbf{r}_0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}2e\oint \mathrm{d}\mathbf{s}\mathbf{A}(\mathbf{s})} = \Psi_0(\mathbf{r}_0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}2e\Phi_B},$$

amelyből, az egyértékűség miatt

$$2n\pi = \frac{2e}{\hbar}\Phi_B \quad \rightarrow \quad \Phi_B = n\frac{h}{2e} \equiv n\Phi_0.$$

Itt bevezettük a szuprevaezető által bezárt mágneses fluxus elemi kvantumát, amely számértéke cgs-egységben:

$$\Phi_0 = \frac{h}{2e} = 2.07\times 10^{-7}\,(\mathrm{G\,cm^2}) = 2.07\times 10^{-11}\,(\mathrm{T\,cm^2}).$$

A mágneses fluxus szupravezető gyűrűk okozta kvantáltságát 1961-ben figyelték meg először. Az effektus azóta nagyprecíziós mérési eljárások részévé vált.

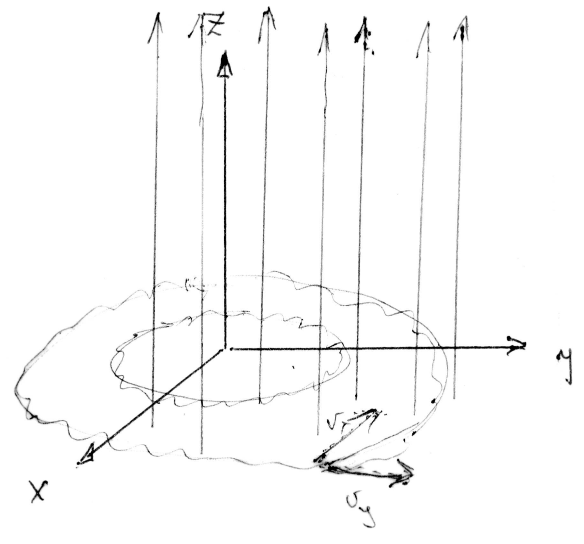
7.9. SZABAD ELEKTRONOK MOZGÁSA HOMOGÉN MÁGNESES TÉRBEN (LANDAU-NÍVÓK)

Vegyük fel koordináta rendszerünk z–tengelyét a *homogén* mágneses tér által kijelölt irányban (51. ábra). Ekkor $\mathbf{B} = \vec{\nabla}\times\mathbf{A}$ miatt az $\mathbf{A}$ vektropotenciál merőleges a z– tengelyre, azaz írható:

$$\mathbf{B} = (0,0,B), \qquad \mathbf{A} = (A_x, A_y, 0).$$

A kinetikus impulzus

$$\mathbf{K} = m\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{p} - q\mathbf{A}$$



51. ábra. A B homogén mágneses térbeli elektronmozgás szemléltetése.

képlete miatt $z-$irányban továbbra is szabad mozgás jellemző, a mágneses potenciál csak az $x-y-$síkbeli mozgásra van befolyással. Az energiaoperátor tehát

$$H = H_\perp + \frac{p_z^2}{2m}.$$

A $z-$irányú mozgás sajátfüggvénye a folytonos energiaspektrumba eső $\exp(\frac{i}{\hbar}p_z z)$ síkhullám. A $z-$re merőleges mozgás Hamilton operátora

$$H_\perp = \frac{m}{2}\left((\dot{x})^2 + (\dot{y})^2\right) = \frac{1}{2m}\left((m\dot{x})^2 + (m\dot{y})^2\right), \quad \text{amely} \quad \text{az} \quad [m\dot{x}, m\dot{y}] = \frac{\hbar}{i}eB_z$$

felcserélési szabály miatt formális analógia fennállását sejteti a harmonikus oszcillátorral.

Az egydimenziós harmonikus oszcillátor energiaoperátorát a következőképpen is felírhatjuk (vö. 2. fejezet):

$$H^{HO} = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 = \frac{1}{2m}\left(P^2 + (m\omega X)^2\right), \quad \text{amelyre} \quad \text{a} \quad [P, m\omega X] = \frac{\hbar}{i}m\omega$$

felcserélési törvény érvényes.

Ha tehát az

$$m\omega = eB \quad \rightarrow \quad \omega = \frac{e}{m}B \equiv \omega_c$$

megfeleltetést alkalmazzuk (ahol bevezettük az ω_c ún. *ciklotron frekvenciát*), akkor az analógia alapján a homogén mágneses térre merőleges irányú elektronmozgás energia sajátértékproblémáját megoldottnak tekinthetjük, mivel tudjuk, hogy

$$E^{HO} = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2...,$$

s ezért

$$E_\perp = \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2}) = \frac{e\hbar}{m}B(n + \frac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2....$$

Tehát $z-$ irányú homogén mágneses tér esetén az $x-y$ síkbeli mozgás energiája kvantált. Ez annak következménye, hogy a kinetikus impulzusok nem felcserélhető volta miatt $\Delta v_x \Delta v_y \neq 0$, s így nem létezhet egyidejűleg határozott v_x és v_y sebességek által kijelölt folytonos pályaeloszlás az elektronmozgás számára az $x-y$ síkban.

7.10. HOMOGÉN ELEKTROMOS TÉR HATÁSA AZ ATOMI NÍVÓKRA (STARK EFFEKTUS)

Tekintsünk egy homogén elektromos térbe helyezett hidrogénatomot. Az elektron mozgását leíró teljes energiaoperátor

$$H = H_0 + V,$$

ahol

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r},$$

a hidrogénatom belső állapotát leíró Hamilton operátor és

$$V = -\int (-e)\vec{\mathcal{E}}\mathrm{d}\mathbf{s} = e\vec{\mathcal{E}}\mathbf{r} = e\mathcal{E}\, z$$

a $z-$irányultságú külső $\vec{\mathcal{E}} = (0,0,\mathcal{E})$ elektromos tér hatását figyelembevevő (perturbációs) potenciál. ($\mathbf{F} = -\vec{\nabla}V = q\vec{\mathcal{E}}$.) E potenciális energia tényleg kis perturbációnak tekinthető, mivel az atomi elektromos terek nagyságrendje a laboratóriumban előállítható $\mathcal{E}_{labor}$ tereknél jóval nagyobb, azaz

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{a_0^2} >> \mathcal{E}_{labor}.$$

Ezért az atomi szintek eltolódásának meghatározásához alkalmazhatjuk az elsőrendű perturbációszámítást. Ehhez, mint láttuk a

$$z_{nlm,n'l'm'} =< \psi_{nlm}|z\psi_{n'm'l'} >$$

matrixelemet kell kiszámítani és azt is megállapítottuk korábban, hogy az $m = m'$, $l = l' \pm 1$, kiválasztási szabályok érvényesek hidrogénatom pályák esetén.

Alkalmazzuk az elsőrendű perturbációszámítás energiaképletét a $k = 1-$es alapállapot esetén.

$$E_k = E_k^{(0)} + E_k^{(1)} = E_1 + < \psi_{100}|V\psi_{100} > .$$

Alapállapotban tehát az elsőrendű korrekció zérus. Ahhoz, hogy a homogén elektromos tér hatását az alapállapoti szintre meghatározhassuk, a másodrendű energiakorrekció általános képletét alkalmazzuk:

$$E_k^{(2)} = \sum_{n\neq k}\frac{|< \psi_n|V\psi_k >|^2}{E_k - E_n} = \sum_{n=2} e^2\mathcal{E}^2\frac{|< \psi_{n10}|z\psi_{100} >|^2}{E_1 - E_n} = -\frac{9}{4}a_0^3\mathcal{E}^2.$$

(E képlet nagyságrendjét minden számolás nélkül is megérthetjük: a számlálóbeli $z-$matrixelem $\sim a_0$, míg a nevezőbeli energiatag $\sim e^2/a_0$ értéket vesz fel.)

Az alapállapoti szintek eltolódását (negatív irányba) másodrendű Stark-effektusnak nevezzük. Összehasonlítva a dielektrumok polarizálhatósági képletével

$$-\frac{1}{2}\alpha_p\mathcal{E}^2 \quad \rightarrow \quad \alpha_p = \frac{9}{2}a_0^3$$

adódik a H-atom polarizálhatóságára.

Amennyiben az $n = 2-$es főkvantumszámmal jellemzett gerjesztett nívó energiaváltozása iránt érdeklődünk, az elsőrendű perturbációszámítást kell alkalmaznunk a négy azonos energiával rendelkező $|200 >, |210 >, |211 >, |21-1 >$ állapotra. Ezen állapotokat rendre az 1-es, 2-es, 3-as és 4-es indexszel jelölve, az energiafelhasadás $E^{(1)}$ elsőrendű korrekcióját megadó karakterisztikus matrix

$$0 = \begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} & V_{13} & V_{14} \\ V_{21} & V_{22} - E^{(1)} & V_{23} & V_{24} \\ V_{31} & V_{32} & V_{33} - E^{(1)} & V_{34} \\ V_{41} & V_{42} & V_{43} & V_{44} - E^{(1)} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -E^{(1)} & V_{12} & 0 & 0 \\ V_{21} & -E^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 - E^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E^{(1)} \end{vmatrix},$$

mivel a V_{12}, V_{21} matrixelemek kivételével az összes többi matrixelem eltűnik az $l = l' \pm 1$ és $m = m'$ kiválasztási szabályok miatt. Így

$$\left(E^{(1)}\right)^2 = V_{12}V_{21} = |<\psi_{210}|e\mathcal{E}\, z\psi_{200}>|^2 = e^2\mathcal{E}^2 I^2,$$

ahol az integrál

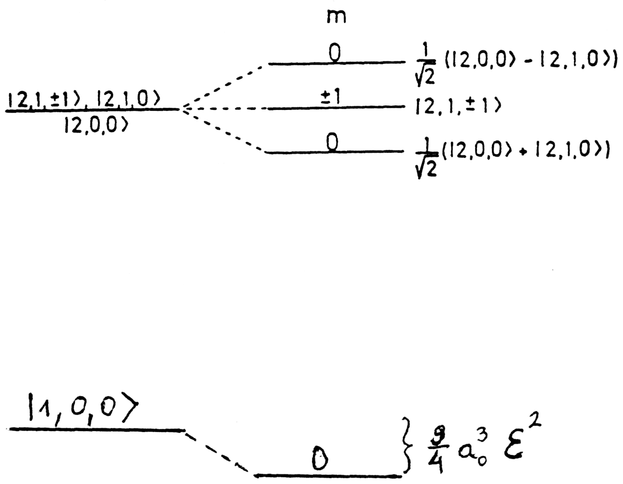
$$I = \int \psi^*_{210}\, z\, \Psi_{200}\mathrm{d}\mathbf{r} = \int_0^\infty R_{21}(r)\, r\, R_{20}(r)\mathrm{d}r \int_0^\pi \mathrm{d}\theta \sin\theta\, Y_1^0(\theta)\, \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\, 2\pi = -3a_0$$

könnyen meghatározható. Tehát a második nívó

$$E_2^{(1)} = \pm 3a_0 e\mathcal{E}$$

energiával hasad fel. Fizikai értelmezése kézenfekvő, minthogy éppen ekkora energiával rendelkezik egy $3a_0$ hosszúságú e töltésű dipólus, amely az $\vec{\mathcal{E}}$ térben azzal egyező $(+)$, illetve ellenkező $(-)$ iránnyal áll be. Ez úgy valósul meg, hogy az elektromos térrel való kölcsönhatás megszünteti az eredetileg meglévő forgásszimmetriát, összekeveri az azonos mágneses kvantumszámhoz $(m = 0)$, de különböző impulzusmomentumhoz $(l = 0, 1)$ tartozó állapotokat. Az $m = \pm 1$−hez tartozó szintek nem tolódnak el. (52. ábra.)

A gerjesztett állapotok dipólszerű felhasadását elsőrendű Stark-effektusnak hívjuk.



52. Ábra. H-nívók felhasadása homogén elektromos tér hatására.