1. Variációs elv

Egy hermitikus Hamilton operátor normált sajátvektorait megkaphatjuk az

$$E\left[\psi\right] = \langle\psi|H\psi\rangle \tag{1}$$

energiafunkcionál

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \tag{2}$$

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

$$F\left[\psi\right] = \langle\psi|H\psi\rangle - \varepsilon\langle\psi|\psi\rangle \tag{3}$$

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

$$\begin{aligned} F\left[\psi + \delta\psi\right] &\simeq \langle\psi|H\psi\rangle + \langle\delta\psi|H\psi\rangle + \langle\psi|H\delta\psi\rangle - \varepsilon\langle\delta\psi|\psi\rangle - \varepsilon\langle\psi|\delta\psi\rangle \\ &= F\left[\psi\right] + \langle\delta\psi|\left(H-\varepsilon\right)\psi\rangle + \langle\psi|\left(H-\varepsilon\right)\delta\psi\rangle \\ &= F\left[\psi\right] + \langle\delta\psi|\left(H-\varepsilon\right)\psi\rangle + \langle\left(H-\varepsilon\right)\psi|\delta\psi\rangle \end{aligned} \tag{4}$$

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

$$\begin{aligned} \delta F\left[\psi, \delta\psi\right] &= F\left[\psi + \delta\psi\right] - F\left[\psi\right] \\ &= \langle\delta\psi|\left(H-\varepsilon\right)\psi\rangle + \langle\left(H-\varepsilon\right)\psi|\delta\psi\rangle = 2\,\mathrm{Re}\langle\delta\psi|\left(H-\varepsilon\right)\psi\rangle\,. \end{aligned} \tag{5}$$

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

$$\begin{aligned} \delta F\left[\psi, i\delta\psi\right] &= \langle i\delta\psi|\left(H-\varepsilon\right)\psi\rangle + \langle\left(H-\varepsilon\right)\psi|i\delta\psi\rangle \\ &= -i\left(\langle\delta\psi|\left(H-\varepsilon\right)\psi\rangle - \langle\left(H-\varepsilon\right)\psi|\delta\psi\rangle\right) = 2\,\mathrm{Im}\langle\delta\psi|\left(H-\varepsilon\right)\psi\rangle\,. \end{aligned} \tag{6}$$

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

$$\delta F\left[\psi\right] = 0 \tag{7}$$

amiből a fentiek alapján

$$\langle\delta\psi|\left(H-\varepsilon\right)\psi\rangle = 0 \iff \left(H-\varepsilon\right)\psi = 0 \tag{8}$$

következik.

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

2. Hartree-Fock módszer

Z rendszámú, N elektronos atom Hamilton operátora

$$H = \sum_{i=1}^{N} H_0\left(\overrightarrow{r}_i\right) + \frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j=1\\(i\neq j)}}^{N} V\left(\overrightarrow{r}_i, \overrightarrow{r}_j\right) \tag{9}$$

$$H_0\left(\overrightarrow{r}_i\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i - \frac{kZe^2}{r_i} \tag{10}$$

$$V\left(\overrightarrow{r}_i, \overrightarrow{r}_j\right) = \frac{ke^2}{\left|\overrightarrow{r}_i - \overrightarrow{r}_j\right|} \tag{11}$$

Slater determináns hullámfüggvény:

$$\psi\left(1,2,\ldots,N\right) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{P(1,\ldots,N)}\left(-1\right)^P P(1,\ldots,N)\varphi_{i_1}\left(1\right)\varphi_{i_2}\left(2\right)\ldots\varphi_{i_N}\left(N\right) \tag{12}$$

$$= \mathcal{A}\,\varphi_{i_1}\left(1\right)\varphi_{i_2}\left(2\right)\ldots\varphi_{i_N}\left(N\right) \tag{13}$$

ahol

$$\mathcal{A} = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{P(1,\ldots,N)}\left(-1\right)^P P(1,\ldots,N) \tag{14}$$

az antiszimmetrizáló operátor és a φ_i egyrészecske függvények ortonormáltak:

$$\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}\ . \tag{15}$$

A rendszer energiáját meghatározó funkcionál a normálási feltétel figyelembevételével

$$F\left(\{\varphi_i\}\right) = \langle\psi|H|\psi\rangle - \sum_{i,j}\varepsilon_{ij}\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle \tag{16}$$

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

A Hamilton-operátor várhatóértékének kiszámítása:

$$\langle\psi|H\psi\rangle = \langle\mathcal{A}\,\varphi_{i_1}\left(1\right)\varphi_{i_2}\left(2\right)\ldots\varphi_{i_N}\left(N\right)|H\mathcal{A}\,\varphi_{i_1}\left(1\right)\varphi_{i_2}\left(2\right)\ldots\varphi_{i_N}\left(N\right)\rangle \tag{17}$$

$$= \langle\varphi_{i_1}\left(1\right)\varphi_{i_2}\left(2\right)\ldots\varphi_{i_N}\left(N\right)|\mathcal{A}H\mathcal{A}\,\varphi_{i_1}\left(1\right)\varphi_{i_2}\left(2\right)\ldots\varphi_{i_N}\left(N\right)\rangle \tag{18}$$

mivel az $\mathcal{A}$ operátor önadjungált.

Nézzük meg $N = 2$-re:

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

$\sum_i H_0(i)$ várhatóértékének számítása:

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

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

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

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

Általánosítás tetszőleges N-re:

$$\langle\mathcal{A}\varphi_{i_1}(1)\,\varphi_{i_2}(2)\ldots\varphi_{i_N}(N)\,|\sum_{i=1}^{N}H_0(i)\,\mathcal{A}\,\varphi_{i_1}(1)\,\varphi_{i_2}(2)\ldots\varphi_{i_N}(N)\rangle = \sum_{k=1}^{N}\langle\varphi_{i_k}(1)\,|H_0(1)\,\varphi_{i_k}(1)\rangle \tag{19}$$

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

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

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

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

Általánosítás tetszőleges N-re:

$$\begin{aligned}&\langle\mathcal{A}\varphi_{i_1}(1)\,\varphi_{i_2}(2)\ldots\varphi_{i_N}(N)\,|\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j=1\\(i\neq j)}}^{N}V(i,j)\,\mathcal{A}\,\varphi_{i_1}(1)\,\varphi_{i_2}(2)\ldots\varphi_{i_N}(N)\rangle\\ &=\frac{1}{2}\sum_{k,l=1}^{N}\langle\varphi_{i_k}(1)\,\varphi_{i_l}(2)\,|V(1,2)\,\varphi_{i_k}(1)\,\varphi_{i_l}(2)\rangle-\frac{1}{2}\sum_{k,l=1}^{N}\langle\varphi_{i_k}(1)\,\varphi_{i_l}(2)\,|V(1,2)\,\varphi_{i_k}(2)\,\varphi_{i_l}(1)\rangle\end{aligned} \tag{20}$$

Tehát a Hamilton-operátor várhatóértéke:

$$\begin{aligned}\langle\psi|H\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N}\langle\varphi_i(1)\,|H_0(1)\,\varphi_i(1)\rangle + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N}\langle\varphi_i(1)\,\varphi_j(2)\,|V(1,2)\,\varphi_i(1)\,\varphi_j(2)\rangle \\ -\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N}\langle\varphi_i(1)\,\varphi_j(2)\,|V(1,2)\,\varphi_j(2)\,\varphi_i(1)\rangle\end{aligned} \tag{21}$$

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

$$\begin{aligned}F(\{\varphi_i\}) = \sum_{i=1}^{N}\langle\varphi_i(1)\,|H_0(1)\,\varphi_i(1)\rangle + \frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j=1\\(i\neq j)}}^{N}\langle\varphi_i(1)\,\varphi_j(2)\,|V(1,2)\,\varphi_i(1)\,\varphi_j(2)\rangle \\ -\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j=1\\(i\neq j)}}^{N}\langle\varphi_i(1)\,\varphi_j(2)\,|V(1,2)\,\varphi_j(2)\,\varphi_i(1)\rangle - \sum_{i,j}\varepsilon_{ij}\,\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle\end{aligned} \tag{22}$$

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

$$\begin{aligned}\delta_{(k)}F(\{\varphi_i\}) = \langle\delta\varphi_k|H_0\varphi_k\rangle + \sum_{\substack{i=1\\(i\neq k)}}^{N}\langle\delta\varphi_k(1)\,\varphi_i(2)\,|V(1,2)\,\varphi_k(1)\,\varphi_i(2)\rangle \\ - \sum_{\substack{i=1\\(i\neq k)}}^{N}\langle\delta\varphi_k(1)\,\varphi_i(2)\,|V(1,2)\,\varphi_k(2)\,\varphi_i(1)\rangle - \sum_{i=1}^{N}\varepsilon_{ki}\,\langle\delta\varphi_k|\varphi_i\rangle\end{aligned} \tag{23}$$

melyet felírhatunk az alábbi módon

$$\delta_{(k)}F(\{\varphi_i\}) = \langle\delta\varphi_k|\frac{\delta F(\{\varphi_i\})}{\delta\langle\varphi_k|}\rangle \tag{24}$$

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

$$\frac{\delta F(\{\varphi_i\})}{\delta\langle\varphi_k|} = H_0\varphi_k + \sum_{\substack{i=1\\(i\neq k)}}^{N}\langle\varphi_i(2)\,|V(1,2)\,\varphi_i(2)\rangle\,\varphi_k - \sum_{\substack{i=1\\(i\neq k)}}^{N}\langle\varphi_i(2)\,|V(1,2)\,\varphi_k(2)\rangle\,\varphi_i - \sum_{i=1}^{N}\varepsilon_{ki}\varphi_i \tag{25}$$

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

$$H_0\varphi_k + \sum_{\substack{i=1\\(i\neq k)}}^{N}\langle\varphi_i(2)\,|V(1,2)\,\varphi_i(2)\rangle\,\varphi_k - \sum_{\substack{i=1\\(i\neq k)}}^{N}\langle\varphi_i(2)\,|V(1,2)\,\varphi_k(2)\rangle\,\varphi_i = \varepsilon_k\varphi_k \tag{26}$$

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

$$\langle \varphi_i(2) | V(1,2) \varphi_i(2) \rangle = \int d^3 r_2 \, \varphi_i(\overrightarrow{r}_2)^* \frac{ke^2}{|\overrightarrow{r}_1 - \overrightarrow{r}_2|} \varphi_i(\overrightarrow{r}_2) \tag{27}$$

és

$$\langle \varphi_i(2) | V(1,2) \varphi_k(2) \rangle = \delta_{m_{s_i} m_{s_k}} \int d^3 r' \, \varphi_i(\overrightarrow{r}_2)^* \frac{ke^2}{|\overrightarrow{r}_1 - \overrightarrow{r}_2|} \varphi_k(\overrightarrow{r}_2) \ . \tag{28}$$

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

Bevezetve az ún. Hartree-potenciált,

$$V^H(\overrightarrow{r}) = \sum_{\substack{i=1 \\ (i \neq k)}}^{N} \int d^3 r' \varphi_i(\overrightarrow{r}')^* \frac{ke^2}{|\overrightarrow{r} - \overrightarrow{r}'|} \varphi_i(\overrightarrow{r}') \tag{29}$$

és a nemlokális kicserélődési potenciált,

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

a HF egyenletek koordináta-reprezentációban a

$$\left(H_0(\overrightarrow{r}) + V^H(\overrightarrow{r}) \right) \varphi_k(\overrightarrow{r}) + \int d^3 r' V^x(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{r}') \varphi_k(\overrightarrow{r}') = \varepsilon_k \varphi_k(\overrightarrow{r}) \qquad (k = 1, 2, \ldots, N) \tag{30}$$

alakban írhatók, melyeket önkonzisztens módon, iterálva lehet megoldani.

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

$$\begin{aligned} \varepsilon_k = & \int d^3 r \, \varphi_k(\overrightarrow{r})^* H_0(\overrightarrow{r}) \varphi_k(\overrightarrow{r}) + \int \int d^3 r \, \varphi_k(\overrightarrow{r})^* V^H(\overrightarrow{r}) \varphi_k(\overrightarrow{r}) \\ & + \int d^3 r \int d^3 r' \varphi_k(\overrightarrow{r})^* V_k^x(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{r}') \varphi_k(\overrightarrow{r}') \ , \end{aligned} \tag{31}$$

vagy

$$\begin{aligned} \varepsilon_k = & \int d^3 r \, \varphi_k(\overrightarrow{r})^* H_0(\overrightarrow{r}) \varphi_k(\overrightarrow{r}) + \sum_{i(\neq k)} \int \int d^3 r \, \varphi_k(\overrightarrow{r})^* \varphi_i(\overrightarrow{r}')^* \frac{ke^2}{|\overrightarrow{r} - \overrightarrow{r}'|} \varphi_k(\overrightarrow{r}) \varphi_i(\overrightarrow{r}') \\ & - \sum_{i(\neq k)} \int d^3 r \int d^3 r' \varphi_k(\overrightarrow{r})^* \varphi_i(\overrightarrow{r}') \frac{ke^2}{|\overrightarrow{r} - \overrightarrow{r}'|} \varphi_k(\overrightarrow{r}') \, \varphi_i(\overrightarrow{r}) , \end{aligned} \tag{32}$$

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

Az egyrészecske energiákat felösszegezve a következő összefüggéshez jutunk:

$$\sum_{k=1}^{N} \varepsilon_k = \langle \psi | H \psi \rangle + E_H + E_x \tag{33}$$

ahol az elektrosztatikus (Hartree) energia

$$E_H = \frac{1}{2}\sum_k \int\int d^3r\, \varphi_k\left(\overrightarrow{r}\right)^* V^H\left(\overrightarrow{r}\right)\varphi_k\left(\overrightarrow{r}\right)$$
$$= \frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j\\(i\neq j)}} \int\int d^3r' d^3r\, \varphi_i\left(\overrightarrow{r}\right)^* \varphi_j\left(\overrightarrow{r}'\right)^* \frac{ke^2}{\left|\overrightarrow{r}-\overrightarrow{r}'\right|}\varphi_i\left(\overrightarrow{r}\right)\varphi_j\left(\overrightarrow{r}'\right) \tag{34}$$

és a kicserélődési energia

$$E_x = \frac{1}{2}\sum_k \int d^3r \int d^3r' \varphi_k\left(\overrightarrow{r}\right)^* V_k^x\left(\overrightarrow{r},\overrightarrow{r}'\right)\varphi_k\left(\overrightarrow{r}'\right)$$
$$= -\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j\\(i\neq j)}} \int d^3r \int d^3r' \varphi_i\left(\overrightarrow{r}\right)^* \varphi_j\left(\overrightarrow{r}'\right)^* \frac{ke^2}{\left|\overrightarrow{r}-\overrightarrow{r}'\right|}\varphi_i\left(\overrightarrow{r}'\right)\varphi_j\left(\overrightarrow{r}'\right)\ . \tag{35}$$

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

3. Impulzusmomentum összeadási szabályok

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

$$\overrightarrow{J}_i : \mathcal{H}_i \to \mathcal{H}_i \ , \ \overrightarrow{J}_i \times \overrightarrow{J}_i = i\hbar \overrightarrow{J}_i \ , \tag{36}$$

$$J_i^2 \,|\, j_i, m_i\rangle_i = \hbar^2 \, j_i \,(j_i+1)\ |j_i, m_i\rangle_i \ , \ J_{i,z} |\, j_i, m_i\rangle_i = \hbar m_i |\, j_i, m_i\rangle_i \ , \tag{37}$$

$$J_{i,\pm} \,|\, j_i, m_i\rangle = \hbar \sqrt{j_i\,(j_i+1) - \ m_i\,(m_i \pm 1)}\ |\, j_i, m_i \pm 1\rangle \ , \tag{38}$$

$$|\, j_i, m_i\rangle_i \in \mathcal{H}_i \quad (i = 1, 2) \ . \tag{39}$$

Terjesszük ki ezen operátorokat a két Hilbert-tér tenzorszorzatára:

$$\overrightarrow{J}_i : \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \ , \tag{40}$$

$$\overrightarrow{J}_1 \to \overrightarrow{J}_1 \otimes \mathbf{1}_2 \ , \ \overrightarrow{J}_2 \to \mathbf{1}_1 \otimes \overrightarrow{J}_2 \ . \tag{41}$$

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

$$J_1^2 \,|\, j_1, m_1\rangle_1 |\, j_2, m_2\rangle_2 = \hbar^2 \, j_1\,(j_1+1)\ |\, j_1, m_1\rangle_1 |\, j_2, m_2\rangle_2 \ , \tag{42}$$

$$J_{1,z} |\, j_1, m_1\rangle_1 |\, j_2, m_2\rangle_2 = \hbar m_1 |\, j_1, m_1\rangle_1 |\, j_2, m_2\rangle_2 \ , \tag{43}$$

$$J_{1,\pm} \,|\, j_1, m_1\rangle_1 |\, j_2, m_2\rangle_2 = \hbar \sqrt{j_1\,(j_1+1) - \ m_1\,(m_1 \pm 1)}\ |\, j_1, m_1 \pm 1\rangle |\, j_2, m_2\rangle_2 \ , \tag{44}$$

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

$$\overrightarrow{J} = \overrightarrow{J}_1 + \overrightarrow{J}_2 \ , \tag{45}$$

is impulzusmomentum operátor, ugyanis:

$$\begin{aligned} \overrightarrow{J} \times \overrightarrow{J} &= \left(\overrightarrow{J}_1 + \overrightarrow{J}_2\right) \times \left(\overrightarrow{J}_1 + \overrightarrow{J}_2\right) \\ &= \overrightarrow{J}_1 \times \overrightarrow{J}_1 + \underbrace{\overrightarrow{J}_1 \times \overrightarrow{J}_2 + \overrightarrow{J}_2 \times \overrightarrow{J}_1}_{0} + \overrightarrow{J}_2 \times \overrightarrow{J}_2 \\ &= i\hbar \overrightarrow{J}_1 + i\hbar \overrightarrow{J}_2 = i\hbar \overrightarrow{J} \ . \end{aligned} \tag{46}$$

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

$$J^2 \,|\, j, m\rangle = \hbar^2 \, j\,(j+1)\ |j, m\rangle \ , \ J_z |\, j, m\rangle = \hbar m |\, j, m\rangle \ , \tag{47}$$

$$J_\pm \,|\, j, m\rangle = \hbar \sqrt{j\,(j+1) - m\,(m \pm 1)}\ |\, j, m \pm 1\rangle \ , \tag{48}$$

$$|\, j, m\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \ , \tag{49}$$

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

$$|j, m\rangle = \sum_{m_1 m_2} C\,(j_1 m_1, j_2 m_2 | j, m)\ |\, j_1, m_1\rangle_1 |\, j_2, m_2\rangle_2 \tag{50}$$

alakban. A $C\,(j_1 m_1, j_2 m_2 | j, m)$ együtthatókat, melyeket szokás $\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j, m\rangle$-vel is jelölni, Clebsch-Gordan együtthatóknak nevezzük. Megállapodás szerint a Clebsch-Gordan együtthatókat valós értékűnek választjuk. Vegyük észre, hogy összesen $(2j_1+1)(2j_2+1)$ ilyen sajátállapot létezik, melyek - mint az ábrázoláselmélet igazolja - a J^2 és J_z határozott sajátaltereire (irreducibilis ábrázolásaira) esnek szét.

A J_z operátor hatása az (50) állapotra kifejezhető mint

$$\begin{aligned} J_z|\,j,m\rangle &= (J_{1,z}+J_{2,z})\sum_{m_1,m_2} C\,(j_1m_1,j_2m_2|j,m)\;|\,j_1,m_1\rangle_1|\,j_2,m_2\rangle_2 \\ &= \sum_{m_1,m_2} \hbar\,(m_1+m_2)\,C\,(j_1m_1,j_2m_2|j,m)\;|\,j_1,m_1\rangle_1|\,j_2,m_2\rangle_2 \\ &= \hbar\,(m_1+m_2)\,|\,j,m\rangle\;, \end{aligned} \tag{51}$$

amiből

$$\boxed{m=m_1+m_2} \tag{52}$$

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

Állítás:

$$|\,j_1+j_2,j_1+j_2\rangle = |\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2\;, \tag{53}$$

azaz,

$$C\,(j_1j_1,j_2j_2|j_1+j_2,j_1+j_2)=1\;. \tag{54}$$

Bizonyítás:

Egyrészt

$$\begin{aligned} J_z|\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2 &= (J_{1,z}+J_{2,z})\,|\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2 \\ &= \hbar\,(j_1+j_2)\,|\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2\;, \end{aligned} \tag{55}$$

másrészt a

$$\begin{aligned} J^2 &= (\underline{J}_1+\underline{J}_2)^2 = J_1^2+J_2^2+2\underline{J}_1\underline{J}_2 \\ &= J_1^2+J_2^2+2J_{1,z}\,J_{2,z}+J_{1,+}\,J_{2,-}+J_{1,-}\,J_{2,+}\;, \end{aligned} \tag{56}$$

azonosság felhasználásával,

$$\begin{aligned} J^2|\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2 &= \hbar^2\left(j_1\,(j_1+1)+j_2\,(j_2+1)+2j_1j_2\right)|\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2 \\ &\quad+\underbrace{J_{1,+}|\,j_1,j_1\rangle_1}_{|\,\rangle_0^1}J_{2,-}|j_2,j_2\rangle_2+J_{1,-}|\,j_1,j_1\rangle_1\underbrace{J_{2,+}|j_2,j_2\rangle_2}_{|\,\rangle_0^2} \\ &= \hbar^2\,(j_1+j_2)\,(j_1+j_2+1)\,|\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2\;, \end{aligned} \tag{57}$$

ahol $|\,\rangle_0^i$ a $\mathcal{H}_i$ Hilbert-tér nulleleme.

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

Példa:

$$J_-|\,j_1+j_2,j_1+j_2\rangle = \hbar\sqrt{2\,(j_1+j_2)}\,|\,j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle \tag{58}$$

$$(J_{1,-}+J_{2,-})\,|\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2 = \hbar\sqrt{2j_1}\,|\,j_1,j_1-1\rangle_1|j_2,j_2\rangle_2+\hbar\sqrt{2j_2}\,|\,j_1,j_1\rangle_1|j_2,j_2-1\rangle_2 \tag{59}$$

$$\Downarrow$$

$$
\begin{aligned}
|\, j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle =& \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}|\, j_1, j_1-1\rangle_1 |j_2, j_2\rangle_2 \\
&+\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}|\, j_1, j_1\rangle_1 |j_2, j_2-1\rangle_2 \ ,
\end{aligned}
\tag{60}
$$

azaz

$$C\left(j_1, j_1-1; j_2 j_2 | j_1+j_2, j_1+j_2-1\right) = \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} \ , \tag{61}$$

valamint

$$C\left(j_1 j_1; j_2, j_2-1 | j_1+j_2, j_1+j_2-1\right) = \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} \ . \tag{62}$$

Nyilvánvaló, hogy a

$$\left(2j_1+1\right)\left(2j_2+1\right) = 2\left(j_1+j_2\right)+1 \tag{63}$$

egyenlőség csak akkor teljesül, ha j_1 vagy j_2 egyike zérus. Ebben az esetben megtaláltuk az összes J^2 és J_z közös sajátfüggvényt, melyre (50) teljesül. Minden más esetben további sajátfüggvényeket kell keresnünk, melyek $j < j_{\max} = j_1 + j_2$ kvantumszámmal rendelkeznek.

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

$$|\, j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle = c_1 |\, j_1, j_1-1\rangle_1 |j_2, j_2\rangle_2 + c_2 |\, j_1, j_1\rangle_1 |j_2, j_2-1\rangle_2 \tag{64}$$

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

$$c_1\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} + c_2\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} = 0 \tag{65}$$

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

$$c_1^2 + c_2^2 = 1 \tag{66}$$

feltételt is, amiből (± 1 szorzófaktor erejéig)

$$c_1 = \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} \ , \ c_2 = -\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} \tag{67}$$

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

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

$$\left(2j_1+1\right)\left(2j_2+1\right) = \sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j+1) \ . \tag{68}$$

Két eset lehetséges: (1) $j \in \mathbb{N}_0$, azaz $2j+1$ páratlan szám. Ismeretes, hogy

$$\sum_{j=0}^{n} (2j+1) = (n+1)^2 \tag{69}$$

$$\Downarrow$$

$$\sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j+1) = (j_{\max}+1)^2 - j_{\min}^2 = (j_1+j_2+1)^2 - j_{\min}^2 \tag{70}$$

(2) $j \in \mathbb{N}_0 + \frac{1}{2}$, azaz $2j+1$ páros szám. Ekkor:

$$\sum_{j=\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} (2j+1) = \sum_{j=\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} 2j + n + 1 = \sum_{j=0}^{n} (2j+1) + n = (n+1)^2 + n + 1 = (n+1)(n+2) \tag{71}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{aligned}\sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j+1) &= \left(j_{\max}+\frac{1}{2}\right)\left(j_{\max}+\frac{3}{2}\right)^2 - \left(j_{\min}-\frac{1}{2}\right)\left(j_{\min}+\frac{1}{2}\right) \\ &= j_{\max}^2 + 2j_{\max} + 1 - j_{\min}^2 = (j_1+j_2+1)^2 - j_{\min}^2\end{aligned} \tag{72}$$

Mindkét esetben tehát azt kapjuk, hogy

$$j_{\min}^2 = (j_1+j_2+1)^2 - (2j_1+1)(2j_2+1) = (j_1+j_2)^2 - 4j_1j_2 = (j_1-j_2)^2 \tag{73}$$

azaz:

$$j_{\min} = |j_1 - j_2| \ . \tag{74}$$

Végeredményben tehát a lehetséges j kvantumszámok:

$$\boxed{j = |j_1-j_2|, |j_1-j_2|+1, \ldots, j_1+j_2-1, j_1+j_2 \ .} \tag{75}$$

Megjegyezzük még a Clebsch-Gordan együtthatók két tulajdonságát:

Ortonormáltság

$$\langle j'm'|jm\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'} \tag{76}$$

$$\langle jm|j'm'\rangle = \sum_{m_1m_2}\sum_{m_1'm_2'} C(j_1m_1;j_2m_2|jm)\,C(j_1m_1';j_2m_2'|j'm')\,\underbrace{\langle j_1m_1|j_1m_1'\rangle_1}_{\delta_{m_1m_1'}}\underbrace{\langle j_1m_1|j_1m_1'\rangle_2}_{\delta_{m_2m_2'}} \tag{77}$$

$$\Downarrow$$

$$\underline{\sum_{m_1m_2} C(j_1m_1;j_2m_2|jm)\,C(j_1m_1;j_2m_2|j'm') = \delta_{jj'}\delta_{mm'} \ .} \tag{78}$$

Teljesség

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{m=-j}^{j} |jm\rangle\langle jm| = P_{j_1j_2} \ , \tag{79}$$

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

$$P_{j_1 j_2} = \sum_{m_1 m_2} |j_1 m_1\rangle_1 \langle j_1 m_1| \otimes |j_2 m_2\rangle_2 \langle j_2 m_2| \tag{80}$$

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

$$\begin{aligned}
&\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{m=-j}^{j} |jm\rangle \langle jm| = \\
&= \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{m=-j}^{j} \sum_{m_1 m_2} \sum_{m_1' m_2'} C\left(j_1 m_1; j_2 m_2 | jm\right) C\left(j_1 m_1'; j_2 m_2' | jm\right)\ |j_1 m_1\rangle_1 \langle j_1 m_1'| \otimes |j_2 m_2\rangle_2 \langle j_2 m_2'| \\
&= \sum_{m_1 m_2} \sum_{m_1' m_2'} \left(\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{m=-j}^{j} C\left(j_1 m_1; j_2 m_2 | jm\right) C\left(j_1 m_1'; j_2 m_2' | jm\right) \right)\ |j_1 m_1\rangle_1 \langle j_1 m_1'| \otimes |j_2 m_2\rangle_2 \langle j_2 m_2'|\ ,
\end{aligned} \tag{81}$$

amiből

$$\underline{\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{m=-j}^{j} C\left(j_1 m_1; j_2 m_2 | jm\right) C\left(j_1 m_1'; j_2 m_2' | jm\right) = \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'}} \tag{82}$$

következik.

4. Szóráselmélet

4.1. Háromdimenziós szórás, Lippmann-Schwinger egyenlet

Idealizált beeső részecske: monokromatikus nyaláb → síkhullám

$$i\hbar\partial_t\psi_0\left(\overrightarrow{r},t\right) = H_0\psi_0\left(\overrightarrow{r},t\right) \tag{83}$$

$$\psi_0\left(\overrightarrow{r},t\right) = A\,e^{i\left(\overrightarrow{k}\overrightarrow{r}-\frac{E}{\hbar}t\right)} \tag{84}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{85}$$

ahol a szabad részecske Hamilton operátora

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2\Delta}{2m}\,. \tag{86}$$

A beeső nyaláb áramsűrűsége

$$\overrightarrow{j}_0 = |A|^2\,\frac{\hbar\overrightarrow{k}}{m} \tag{87}$$

A szórásprobléma:

$$i\hbar\partial_t\psi\left(\overrightarrow{r},t\right) = \left(H_0 + V\left(\overrightarrow{r}\right)\right)\psi\left(\overrightarrow{r},t\right) \tag{88}$$

ahol $V\left(\overrightarrow{r}\right)$ a szóródó részecskék és a szórási objektum (target) közötti kölcsönhatást leíró potenciális energia.

Rugalmas szórás → a részecske energiája megmarad

$$\psi\left(\overrightarrow{r},t\right) = \psi\left(\overrightarrow{r}\right)\,e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \tag{89}$$

$$\left(H_0 + V\left(\overrightarrow{r}\right)\right)\,\psi\left(\overrightarrow{r}\right) = E\,\psi\left(\overrightarrow{r}\right) \tag{90}$$

Ansatz a stacionárius megoldásra: *szórt hullám*

$$\underline{\psi\left(\overrightarrow{r}\right) = \psi_0\left(\overrightarrow{r}\right) + \psi_{sz}\left(\overrightarrow{r}\right)} \tag{91}$$

Behelyettesítve a Schrödinger egyenletbe

$$\left(H_0 + V\left(\overrightarrow{r}\right)\right)\,\left(\psi_0\left(\overrightarrow{r}\right) + \psi_{sz}\left(\overrightarrow{r}\right)\right) = E\,\left(\psi_0\left(\overrightarrow{r}\right) + \psi_{sz}\left(\overrightarrow{r}\right)\right) \tag{92}$$

$$\left(H_0 + V\left(\overrightarrow{r}\right)\right)\psi_{sz}\left(\overrightarrow{r}\right) + V\left(\overrightarrow{r}\right)\psi_0\left(\overrightarrow{r}\right) = E\,\psi_{sz}\left(\overrightarrow{r}\right) \tag{93}$$

$$\left(H_0 - E\right)\psi_{sz}\left(\overrightarrow{r}\right) = -V\left(\overrightarrow{r}\right)\left(\psi_0\left(\overrightarrow{r}\right) + \psi_{sz}\left(\overrightarrow{r}\right)\right) \tag{94}$$

$$\underline{\left(H_0 - E\right)\psi_{sz}\left(\overrightarrow{r}\right) = -V\left(\overrightarrow{r}\right)\,\psi\left(\overrightarrow{r}\right)} \tag{95}$$

A szabad rendszer Green függvénye

$$\left(H_0\left(\overrightarrow{r}'\right) - E\right)\,G_0\left(\overrightarrow{r}',\overrightarrow{r},E\right) = -\delta\left(\overrightarrow{r}' - \overrightarrow{r}\right) \tag{96}$$

$$\Downarrow \tag{97}$$

$$\psi_{sz}\left(\overrightarrow{r}\right) = \int G_0\left(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{r}', E\right) V\left(\overrightarrow{r}'\right) \psi\left(\overrightarrow{r}'\right) d^3 r' \tag{98}$$

Lippmann-Schwinger egyenlet

$$\underline{\psi\left(\overrightarrow{r}\right) = \psi_0\left(\overrightarrow{r}\right) + \int G_0\left(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{r}', E\right) V\left(\overrightarrow{r}'\right) \psi\left(\overrightarrow{r}'\right) d^3 r'} \tag{99}$$

Rezolvens operátor

$$\left(H_0 - E\right) G_0\left(E\right) = -\mathbb{I} \tag{100}$$

$$H_0 = \sum_n \varepsilon_n \left|n\right\rangle \left\langle n\right| \tag{101}$$

$$\sum_n \left(E - \varepsilon_n\right) \left|n\right\rangle \left\langle n\right| G_0\left(E\right) = \mathbb{I} \tag{102}$$

$$\left(E - \varepsilon_n\right) \left\langle n\right| G_0\left(E\right) \left|m\right\rangle = \delta_{nm} \tag{103}$$

$$\left\langle n\right| G_0\left(E\right) \left|m\right\rangle = \delta_{nm} \frac{1}{E - \varepsilon_n} \tag{104}$$

A zérus nevező elkerülése érdekében az energia változót kiterjesztjük a komplex síkra:

$$\left\langle n\right| G_0^{\pm}\left(E\right) \left|m\right\rangle = \delta_{nm} \frac{1}{E \pm i0 - \varepsilon_n} \tag{105}$$

azaz a rezolvens operátor spektrálfelbontása:

$$G_0^{\pm}\left(E\right) = \sum_n \frac{\left|n\right\rangle \left\langle n\right|}{E \pm i0 - \varepsilon_n} \tag{106}$$

illetve a Green-függvény:

$$G_0^{\pm}\left(\overrightarrow{r}', \overrightarrow{r}, E\right) = \sum_n \frac{\left\langle \overrightarrow{r}' \middle| n\right\rangle \left\langle n \middle| \overrightarrow{r}\right\rangle}{E \pm i0 - \varepsilon_n} = \sum_n \frac{\varphi_n\left(\overrightarrow{r}'\right) \varphi_n\left(\overrightarrow{r}\right)^*}{E \pm i0 - \varepsilon_n} \tag{107}$$

Kifutó hullám Green függvénye $\left(E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)$:

$$G_0^{+}\left(\overrightarrow{r}', \overrightarrow{r}, E + i0\right) = \frac{1}{h^3} \int \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \overrightarrow{p}\left(\overrightarrow{r} - \overrightarrow{r}'\right)}}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + i0 - \frac{p^2}{2m}} d^3 p = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{ik\left|\overrightarrow{r}' - \overrightarrow{r}\right|}}{4\pi \left|\overrightarrow{r}' - \overrightarrow{r}\right|} \tag{108}$$

A Lippmann-Schwinger egyenlet megoldása: Born sorozat

$$\psi = \psi_0 + G_0 V \psi \tag{109}$$

$$\psi^{(0)} = \psi_0 \tag{110}$$

$$\psi^{(1)} = \psi_0 + G_0 V \psi^{(0)} = \psi_0 + G_0 V \psi_0 \tag{111}$$

$$\psi^{(2)} = \psi_0 + G_0 V \psi^{(1)} = \psi_0 + G_0 V \psi_0 + \left(G_0 V\right)^2 \psi_0 \tag{112}$$

$$\psi^{(3)} = \psi_0 + G_0 V \psi^{(2)} = \psi_0 + G_0 V \psi_0 + \left(G_0 V\right)^2 \psi_0 + \left(G_0 V\right)^3 \psi_0 \tag{113}$$

$$\Downarrow$$

$$\psi = \psi_0 + G_0 \sum_{n=0}^{\infty} (VG_0)^n \, V\psi_0 \tag{114}$$

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

$$\sum_{n=0}^{\infty} (VG_0)^n = (\mathbb{I} - VG_0)^{-1} \tag{115}$$

és az LS-egyenlet megoldása a

$$\psi = \psi_0 + G_0 (\mathbb{I} - VG_0)^{-1} \, V\psi_0 \tag{116}$$

alakban írható. További átalakítással,

$$G_0 (\mathbb{I} - VG_0)^{-1} = \left(G_0^{-1} - V\right)^{-1} = (E - H_0 - V)^{-1} = (E - H)^{-1} = G(E) \tag{117}$$

a szóró közeg Hamilton operátorának rezolvensét kapjuk, mellyel

$$\psi = \psi_0 + GV \, \psi_0 \tag{118}$$

illetve koordinátareprezentációban:

$$\psi(\overrightarrow{r}) = \psi_0(\overrightarrow{r}) + \int G(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{r}', E) \, V(\overrightarrow{r}') \, \psi_0(\overrightarrow{r}') \, d^3r' \, . \tag{119}$$

Első Born közelítés

$$\psi(\overrightarrow{r}) \simeq \psi^{(1)}(\overrightarrow{r}) = \psi_0(\overrightarrow{r}) + \int G_0(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{r}', E) \, V(\overrightarrow{r}') \, \psi_0(\overrightarrow{r}') \, d^3r' \tag{120}$$

Aszimptotikus forma

$$k\,|\overrightarrow{r}' - \overrightarrow{r}| \underset{\overrightarrow{e}_r = \frac{\overrightarrow{r}}{r}}{=} kr\sqrt{\left(\overrightarrow{e}_r - \frac{\overrightarrow{r}'}{r}\right)^2} = kr\sqrt{1 - \frac{2\overrightarrow{r}\,\overrightarrow{r}'}{r^2} + \frac{r'^2}{r^2}} \underset{r \gg r'}{\rightarrow} kr\left(1 - \frac{\overrightarrow{r}\,\overrightarrow{r}'}{r^2}\right) \tag{121}$$

$$G_0(\overrightarrow{r}', \overrightarrow{r}, E + i0) \rightarrow -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{4\pi r} e^{-i\overrightarrow{k}'\overrightarrow{r}'} \tag{122}$$

ahol

$$\overrightarrow{k}' = k\overrightarrow{e}_r = k\frac{\overrightarrow{r}}{r} \tag{123}$$

$$\psi_{sz}(\overrightarrow{r}) \simeq -\frac{e^{ikr}}{r}\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\overrightarrow{k}'\overrightarrow{r}'} V(\overrightarrow{r}') \, e^{i\overrightarrow{k}\,\overrightarrow{r}'} \, d^3r' \tag{124}$$

$$\Downarrow$$

$$\underline{\psi(\overrightarrow{r}) \simeq A\left(e^{i\overrightarrow{k}\,\overrightarrow{r}} + f(\overrightarrow{q})\,\frac{e^{ikr}}{r}\right)} \tag{125}$$

Szórásamplitúdó

$$\underline{f(\overrightarrow{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(\overrightarrow{r}') \, e^{-i\overrightarrow{q}\,\overrightarrow{r}'} \, d^3r'} \tag{126}$$

ahol

$$\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k} = k\frac{\vec{r}}{r} - \vec{k} = k\left(\vec{e}_r - \vec{e}_k\right) \tag{127}$$

Szokásos jelölés:

$$f\left(\vec{q}\right) = f\left(\vartheta, \varphi\right) \tag{128}$$

ahol ϑ és φ az $\vec{e}_r$ irányvektor azimutális és polárszöge $\vec{e}_k = \vec{e}_z$ választással:

$$\vec{q}^{\,2} = 2k^2\left(1 - \vec{e}_k \vec{e}_r\right) = 2k^2\left(1 - \cos\vartheta\right) = 4k^2 \sin^2\frac{\vartheta}{2} \rightarrow q = 2k\sin\frac{\vartheta}{2} \tag{129}$$

A beeső hullám áramsűrűsége:

$$\vec{j}_0 = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} \tag{130}$$

A szórt hullám áramsűrűsége:

$$\vec{j}_{sz}\vec{e}_r \simeq \mathrm{Re}\left(\frac{\hbar}{mi}\psi_{sz}^*\left(\vec{r}\right)\partial_r\psi_{sz}\left(\vec{r}\right)\right) \simeq |A|^2 \frac{\hbar k}{m}\frac{\left|f\left(\vartheta,\varphi\right)\right|^2}{r^2} = j_0\frac{\left|f\left(\vartheta,\varphi\right)\right|^2}{r^2} \tag{131}$$

A hatáskeresztmetszet és szórásamplitúdó kapcsolata:

$$dN\left(\vartheta,\varphi\right) = \sigma\left(\vartheta,\varphi\right)\ j_0 d\Omega \tag{132}$$

$$\underline{\sigma\left(\vartheta,\varphi\right)} = \frac{dN}{j_0 d\Omega} = \frac{\left(\vec{j}_{sz}\vec{e}_r\right) r^2 d\Omega}{j_0 d\Omega} = \underline{\left|f\left(\vartheta,\varphi\right)\right|^2} \tag{133}$$

$$\sigma\left(\vartheta,\varphi\right) = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int V\left(\vec{r}\right)\ e^{-i\vec{q}\vec{r}}\ d^3r\right|^2 \tag{134}$$

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

$$V\left(\vec{r}\right) = \sum_i V_0\left(\vec{r} - \vec{R}_i\right)\ . \tag{135}$$

Ekkor

$$\int V\left(\vec{r}'\right)\ e^{i\vec{q}\vec{r}}\ d^3r' = \left(\int V_0\left(\vec{r}\right)\ e^{-i\vec{q}\vec{r}}\ d^3r\right)\sum_i e^{i\vec{q}\vec{R}_i} \tag{136}$$

ezért a differenciális hatáskeresztmetszet

$$\underline{\sigma\left(\vec{q}\right) = \sigma_0\left(\vec{q}\right)\ S\left(\vec{q}\right)} \tag{137}$$

ahol az egy atomi potenciálhoz rendelt hatáskeresztmetszetet *alakfaktorn*ak nevezzük:

$$\sigma_0\left(\vec{q}\right) = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int V_0\left(\vec{r}\right)\ e^{-i\vec{q}\vec{r}}\ d^3r\right|^2 \tag{138}$$

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

$$S\left(\vec{q}\right) = \sum_{i,j} e^{i\vec{q}\left(\vec{R}_j - \vec{R}_i\right)}\ . \tag{139}$$

4.2. Parciális hullámok módszere

Általános megoldás gömbszimmetrikus potenciálra:

$$\psi\left(E, \overrightarrow{r}\right) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} c_{\ell m} u_{\ell}\left(E, r\right) Y_{\ell}^{m}\left(\vartheta, \varphi\right) \tag{140}$$

ahol

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell\left(\ell+1\right)}{r^2} + V\left(r\right) - E\right) u_{\ell}\left(E, r\right) = 0\,. \tag{141}$$

A z irányból beeső síkhullám esetén hengerszimmetrikus megoldást várunk, ezért a hullámfüggvényt a

$$\psi\left(E, \overrightarrow{r}\right) = \sum_{\ell} c_{\ell} u_{\ell}\left(E, r\right) Y_{\ell}^{0}\left(\vartheta\right) = \sum_{\ell} c_{\ell} \frac{R_{\ell}\left(E, r\right)}{r} Y_{\ell}^{0}\left(\vartheta\right) \tag{142}$$

alakban vesszük fel, ahol

$$Y_{\ell}^{0}\left(\vartheta\right) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_{\ell}\left(\cos\vartheta\right) \tag{143}$$

és $P_{\ell}\left(x\right)$ a Legendre polinomok, az $R_{\ell}\left(E, r\right)$ függvények pedig kielégítik a

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell\left(\ell+1\right)}{r^2} - \frac{2mV\left(r\right)}{\hbar^2} + k^2\right) u_{\ell}\left(E, r\right) = 0 \tag{144}$$

radiális Schrödinger egyenletet.

$V = 0$ esetén

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell\left(\ell+1\right)}{r^2} + k^2\right) R_{\ell}\left(r\right) = 0 \tag{145}$$

az origóban véges (reguláris) megoldások:

$$R_{\ell}^{\mathrm{reg}}\left(r\right) = r\, j_{\ell}\left(kr\right) \tag{146}$$

ahol $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ és $j_{\ell}\left(x\right)$ az elsőrendű gömbi Bessel függvények, melyek az alábbi határfeltételeknek tesznek eleget:

$$j_{\ell}\left(x\right) \underset{x\to 0}{\longrightarrow} \frac{x^{\ell}}{\left(2\ell+1\right)!!} \text{ és } j_{\ell}\left(x\right) \underset{x\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{x}\sin\left(x - \ell\frac{\pi}{2}\right)\,. \tag{147}$$

Az origóban divergens megoldások

$$R_{\ell}^{\mathrm{irreg}}\left(r\right) = r\, n_{\ell}\left(kr\right) \tag{148}$$

ahol az $n_{\ell}\left(x\right)$ a másodrendű (irreguláris) gömbi Bessel függvények (v. Neumann függvények) az alábbi határértékekkel:

$$n_{\ell}\left(x\right) \underset{x\to 0}{\longrightarrow} -\frac{\left(2\ell-1\right)!!}{x^{\ell+1}} \text{ és } n_{\ell}\left(x\right) \underset{x\to\infty}{\longrightarrow} -\frac{1}{x}\cos\left(x - \ell\frac{\pi}{2}\right)\,. \tag{149}$$

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

$$\psi\left(\overrightarrow{r}\right) = \sum_{\ell}\left[A_{\ell} j_{\ell}\left(kr\right) - B_{\ell} n_{\ell}\left(kr\right)\right] Y_{\ell}^{0}\left(\vartheta\right) \tag{150}$$

$$\simeq \sum_{\ell}\frac{1}{kr}\left[A_{\ell}\sin\left(kr - \ell\frac{\pi}{2}\right) + B_{\ell}\cos\left(kr - \ell\frac{\pi}{2}\right)\right] Y_{\ell}^{0}\left(\vartheta\right) \tag{151}$$

alakban ($A_\ell, B_\ell \in \mathbb{C}$). A parciális hullámokat (egy komplex szorzófaktor erejéig) valós függvénynek választva,

$$\psi(\overrightarrow{r}) = \sum_\ell \frac{C_\ell}{kr}\left[\cos\delta_\ell \sin\left(kr - \ell\frac{\pi}{2}\right) + \sin\delta_\ell\cos\left(kr - \ell\frac{\pi}{2}\right)\right] Y_\ell^0(\vartheta) \tag{152}$$

$$= \sum_\ell \frac{C_\ell}{kr}\sin\left(kr - \ell\frac{\pi}{2} + \delta_\ell\right) Y_\ell^0(\vartheta) \tag{153}$$

ahol $C_\ell \in \mathbb{C}$ és $\delta_\ell \in \mathbb{R}$. Az utóbbi mennyiséget (értelemszerűen) *parciális fázistolás*nak hívjuk.

$\overrightarrow{k} = k\overrightarrow{e}_z$ választással a beeső síkhullám kifejtése a gömbi Bessel függvények szerint (Bauer azonosság):

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\vartheta} = \sum_\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)} i^\ell j_\ell(kr) Y_\ell^0(\vartheta) \tag{154}$$

Így a szórásmegoldás aszimptotikus alakja:

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

$$= \sum_\ell \frac{1}{kr}\sqrt{4\pi(2\ell+1)} i^\ell \sin\left(kr - \ell\frac{\pi}{2}\right) Y_\ell^0(\vartheta) + f(\vartheta)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{155}$$

$$= \sum_\ell \frac{1}{kr}\sqrt{4\pi(2\ell+1)} i^\ell \frac{e^{i\left(kr-\ell\frac{\pi}{2}\right)} - e^{-i\left(kr+\ell\frac{\pi}{2}\right)}}{2i} Y_\ell^0(\vartheta) + f(\vartheta)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{156}$$

$$= \frac{e^{ikr}}{r}\left(f(\vartheta) + \sum_\ell \frac{1}{2ki}\sqrt{4\pi(2\ell+1)} Y_\ell^0(\vartheta)\right) + \frac{e^{-ikr}}{r}\sum_\ell \frac{(-1)^\ell}{2ki}\sqrt{4\pi(2\ell+1)} Y_\ell^0(\vartheta) \tag{157}$$

mely tehát egy kifutó és befutó gömbhullám szuperpozíciója.

Ezt kell összevetnünk a (153) függvényalakkal:

$$\psi(\overrightarrow{r}) = \sum_\ell \frac{C_\ell}{kr}\frac{e^{i\left(kr-\ell\frac{\pi}{2}+\delta_\ell\right)} - e^{-i\left(kr-\ell\frac{\pi}{2}+\delta_\ell\right)}}{2i} Y_\ell^0(\vartheta) \tag{158}$$

$$= \frac{e^{ikr}}{r}\left(\sum_\ell \frac{C_\ell e^{i\delta_\ell} i^{-\ell-1}}{2k} Y_\ell^0(\vartheta)\right) - \frac{e^{-ikr}}{r}\left(\sum_\ell \frac{C_\ell e^{-i\delta_\ell} i^{\ell-1}}{2k} Y_\ell^0(\vartheta)\right) \tag{159}$$

A befutó gömbhullám együtthatóinak azonosságából:

$$\frac{(-1)^\ell}{2ki}\sqrt{4\pi(2\ell+1)} = \frac{C_\ell e^{-i\delta_\ell} i^{\ell-1}}{2k} \Rightarrow C_\ell = e^{i\delta_\ell} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)} \tag{160}$$

és a kifutó gömbhullám együtthatónak azonosságából,

$$f(\vartheta) + \sum_\ell \frac{1}{2ki}\sqrt{4\pi(2\ell+1)} Y_\ell^0(\vartheta) = \sum_\ell \frac{C_\ell e^{i\delta_\ell} i^{-\ell-1}}{2k} Y_\ell^0(\vartheta) = \sum_\ell \frac{e^{2i\delta_\ell}}{2ki}\sqrt{4\pi(2\ell+1)} Y_\ell^0(\vartheta) \tag{161}$$

kapjuk a szórási amplitúdót a fázistolások segítségével:

$$\underline{f(\vartheta)} = \sum_\ell \frac{e^{2i\delta_\ell} - 1}{2ki}\sqrt{4\pi(2\ell+1)} Y_\ell^0(\vartheta) \tag{162}$$

$$\underline{= \sum_\ell \frac{\sqrt{4\pi(2\ell+1)}}{k} e^{i\delta_\ell}\sin\delta_\ell Y_\ell^0(\vartheta)} \tag{163}$$

A teljes hatáskeresztmetszet:

$$\sigma_{\rm tot} = \int d\Omega\, \sigma(\vartheta) = \int d\Omega\, |f(\vartheta)|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_\ell (2\ell+1)\, \sin^2 \delta_\ell \tag{164}$$

ahol felhasználtuk az $Y_\ell^0(\vartheta)$ gömbharmonikusok ortonormáltságát.

4.3. Optikai tétel

$$\mathrm{Im}\, f(\vartheta) = \sum_\ell \frac{\sqrt{4\pi(2\ell+1)}}{k} \sin^2 \delta_\ell\, Y_\ell^0(\vartheta) \tag{165}$$

$$\mathrm{Im}\, f(\vartheta = 0) = \frac{1}{k} \sum_\ell (2\ell+1)\, \sin^2 \delta_\ell \tag{166}$$

azaz

$$\underline{\sigma_{\rm tot} = \frac{4\pi}{k}\, \mathrm{Im}\, f(\vartheta = 0)} \tag{167}$$

Az előreszórás amplitúdójának imaginárius része tehát arányos a teljes hatáskeresztmetszettel. Ez a tétel a szórási folyamatokra a valószínűség megmaradását fejezi ki. A befutó síkhullám valószínűségi áramfluxusa egy zárt térfogatra zérus, míg a kifutó gömbhullám valószínűségi áramfluxusa arányos a teljes hatáskereszmetszettel. Stacionárius esetben a teljes valószínűségi áramfluxusnak el kell tűnnie egy zárt felületen. A szuperpozíció elve miatt ezt csak egyféleképpen lehet biztosítani: a továbbmenő síkhullámból interferenciával ki kell oltani annyit, aminek a valószínűségi áramfluxusa annyi, amennyi a kifutó gömbhullám (szórt hullám) áramfluxusa. Az optikai tétel rugalmas és rugalmatlan szórásra egyaránt érvényes.

Bizonyítás rugalmas szórásra:

$$\psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}) + \psi_{sz}(\vec{r}) \tag{168}$$

Valószínűségi áramsűrűség

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right) = \frac{\hbar}{2mi}\left[(\psi_0^* + \psi_{sz}^*)\, \vec{\nabla}\, (\psi_0 + \psi_{sz}) - (\psi_0 + \psi_{sz})\, \vec{\nabla}\, (\psi_0^* + \psi_{sz}^*)\right] \tag{169}$$

$$\vec{j} = \vec{j}_0 + \vec{j}_{sz} + \vec{j}_{\rm int} \tag{170}$$

Beeső hullám áramsűrűsége

$$\vec{j}_0 = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_0^* \vec{\nabla}\psi_0 - \psi_0 \vec{\nabla}\psi_0^*\right) \tag{171}$$

Szórt hullám áramsűrűsége

$$\vec{j}_{sz} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_{sz}^* \vec{\nabla}\psi_{sz} - \psi_{sz} \vec{\nabla}\psi_{sz}^*\right) \tag{172}$$

Szuperponált hullámok áramsűrűsége (interferencia tag)

$$\vec{j}_{\rm int} = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi_0^* \vec{\nabla}\psi_{sz} + \psi_{sz}^* \vec{\nabla}\psi_0 - \psi_0 \vec{\nabla}\psi_{sz}^* - \psi_{sz} \vec{\nabla}\psi_0^*\right] \tag{173}$$

ennek radiális komponense

$$\vec{j}_{\rm int}\vec{e}_r = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi_0^* \partial_r \psi_{sz} + \psi_{sz}^* \partial_r \psi_0 - \psi_0 \partial_r \psi_{sz}^* - \psi_{sz} \partial_r \psi_0^*\right] \tag{174}$$

aszimptotikus tartományban

$$\psi_0\left(\overrightarrow{r}\right)=e^{ikr\cos\vartheta}\rightarrow\partial_r\psi_0\left(\overrightarrow{r}\right)=ik\cos\vartheta e^{ikr\cos\vartheta} \tag{175}$$

$$\psi_{sz}\left(\overrightarrow{r}\right)=f\left(\vartheta,\varphi\right)\frac{e^{ikr}}{r}\rightarrow\partial_r\psi_{sz}\left(\overrightarrow{r}\right)=ikf\left(\vartheta,\varphi\right)\frac{e^{ikr}}{r}+o\left(\frac{1}{r^2}\right) \tag{176}$$

$$\overrightarrow{j}_{\text{int}}\overrightarrow{e}_r\simeq\frac{\hbar k}{2mr}\left[e^{ikr(1-\cos\vartheta)}f\left(\vartheta,\varphi\right)+e^{-ikr(1-\cos\vartheta)}\cos\vartheta\, f^*\left(\vartheta,\varphi\right)\right. \tag{177}$$
$$\left.+\,e^{-ikr(1-\cos\vartheta)}f^*\left(\vartheta,\varphi\right)+e^{ikr(1-\cos\vartheta)}\cos\vartheta\, f\left(\vartheta,\varphi\right)\right]$$

$$\simeq\frac{\hbar k}{2mr}\left[e^{ikr(1-\cos\vartheta)}\left(1+\cos\vartheta\right)f\left(\vartheta,\varphi\right)+e^{-ikr(1-\cos\vartheta)}\left(1+\cos\vartheta\right)f^*\left(\vartheta,\varphi\right)\right] \tag{178}$$

$$=\frac{\hbar k}{mr}\,\mathrm{Re}\left(e^{ikr(1-\cos\vartheta)}\left(1+\cos\vartheta\right)f\left(\vartheta,\varphi\right)\right) \tag{179}$$

Ha $\vartheta\neq0$, akkor $1-\cos\vartheta\neq0$, ezért $kr\gg1$ miatt $e^{ikr(1-\cos\vartheta)}$ ϑ függvényében igen gyorsan oszcillál. Mivel az $\left(1+\cos\vartheta\right)f\left(\vartheta,\varphi\right)$ függvény ehhez képest lassan változik, az interferencia áramsűrűség integrálja a térszög egy $\vartheta=0$ körüli kis tartományán kívűl zérusra átlagolódik, és a fluxushoz csak a $0\leq\vartheta\leq\delta\vartheta$, $0\leq\varphi\leq2\pi$ kúpszögből kapunk járulékot, ahol $\delta\vartheta$ egy zérustól különböző kis érték. Az interferencia áramsűrűséget ebben a tartományban az alábbi módon közelíthetjük:

$$\lim_{\vartheta\to0}\overrightarrow{j}_{\text{int}}\overrightarrow{e}_r\simeq\frac{2\hbar k}{mr}\,\mathrm{Re}\left(e^{ikr\vartheta^2/2}f\left(\vartheta=0\right)\right) \tag{180}$$

és a megfelelő fluxus:

$$\int d\Omega\,\overrightarrow{j}_{\text{int}}\overrightarrow{e}_r\simeq\frac{2\hbar k}{mr}\,\mathrm{Re}\left(f\left(0\right)\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\delta\vartheta}d\vartheta\,\sin\vartheta e^{ikr\vartheta^2/2}\right) \tag{181}$$

$$\simeq\frac{4\pi\hbar k}{mr}\,\mathrm{Re}\left(f\left(0\right)\int_0^{\delta\vartheta}d\vartheta\,\vartheta e^{ikr\vartheta^2/2}\right)\underset{x=\vartheta^2/2}{=}\frac{4\pi\hbar k}{mr}\,\mathrm{Re}\left(f\left(0\right)\int_0^{\delta x}dx\,e^{ikrx}\right) \tag{182}$$

$$=\frac{4\pi\hbar k}{mr}\,\mathrm{Re}\left(\frac{f\left(0\right)}{ikr}\left(e^{ikr\delta x}-1\right)\right) \tag{183}$$

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

$$\lim_{\alpha\to+0}G_0^+\left(\overrightarrow{r}',\overrightarrow{r},E+i\alpha\right)=-\frac{2m}{\hbar^2}\lim_{\beta\to+0}\frac{e^{i(k+i\beta)\left|\overrightarrow{r}'-\overrightarrow{r}\right|}}{4\pi\left|\overrightarrow{r}'-\overrightarrow{r}\right|} \tag{184}$$

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

$$e^{i(k+i\beta)r\delta x}=e^{ikr\delta x}e^{-\beta r\delta x}\overset{r\to\infty}{\rightarrow}0 \tag{185}$$

így az interferencia áramsűrűség fluxusából az oszcilláló tagot elhagyhatjuk:

$$\int d\Omega\,\overrightarrow{j}_{\text{int}}\overrightarrow{e}_r\simeq\frac{4\pi\hbar k}{mr}\,\mathrm{Re}\left(-\frac{f\left(0\right)}{ikr}\right)\simeq-\frac{4\pi}{r^2}\frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\,f\left(0\right) \tag{186}$$

A beeső síkhullám valószínűségi áramfluxusa

$$\int d\Omega\,\overrightarrow{j}_0\overrightarrow{e}_r=\frac{\hbar\overrightarrow{k}}{m}\int d\Omega\,\overrightarrow{e}_r=0 \tag{187}$$

A szórt hullám valószínűségi áramfluxusa

$$r^2 \int d\Omega \, \overrightarrow{j}_{sz} \overrightarrow{e}_r = \frac{\hbar k}{m} \sigma_{\text{tot}} \tag{188}$$

A stacionárius hullámfüggvény teljes valószínűségi áramfluxusa zérus:

$$r^2 \int d\Omega \, \overrightarrow{j} \overrightarrow{e}_r = \frac{\hbar k}{m} \sigma_{\text{tot}} - 4\pi \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} f(0) = 0 \tag{189}$$

$$\Downarrow$$

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0) \tag{190}$$

5. Kvantummechanikai leírási módok (képek)

5.1. Schrödinger kép

Időfüggetlen Hamilton operátor

$$\partial_t H^S(t) = 0 \tag{191}$$

Időfüggő Schrödinger egyenlet

$$\underline{i\hbar\partial_t \psi^S(t) = H^S \psi^S(t)} \tag{192}$$

Határfeltétel a hullámfüggvényre

$$\psi^S(t_0) = \varphi \tag{193}$$

Időfejlesztő operátor

$$\psi^S(t) = U(t, t_0)\, \psi^S(t_0) \tag{194}$$

$$U(t_0, t_0) = I \tag{195}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H^S U(t, t_0) \tag{196}$$

$$U(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} H^S U(t', t_0)\, dt' \tag{197}$$

$$U^{(k+1)}(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} H^S U^{(k)}(t', t_0)\, dt' \tag{198}$$

$$U^{(0)}(t, t_0) = I \tag{199}$$

$$U^{(1)}(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} H^S dt' = I - \frac{i}{\hbar} H^S (t - t_0) \tag{200}$$

$$U^{(2)}(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} H^S (t - t_0) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \frac{\left(H^S\right)^2 (t - t_0)^2}{2} \tag{201}$$

$$U^{(3)}(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} H^S (t - t_0) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \frac{\left(H^S\right)^2 (t - t_0)^2}{2} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3 \frac{\left(H^S\right)^3 (t - t_0)^3}{3!} \tag{202}$$

$$U^{(k)}(t, t_0) = \sum_{l=0}^{k} \frac{1}{l!} \left(-\frac{i}{\hbar} H^S (t - t_0)\right)^l \tag{203}$$

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H^S (t - t_0)} \tag{204}$$

$$\left[U(t, t_0), H^S\right] = 0 \tag{205}$$

Az időfejlesztő operátor unitér:

$$i\hbar \frac{d}{dt} U^\dagger(t, t_0) = -U^\dagger(t, t_0)\, H^S \tag{206}$$

$$\frac{d}{dt}\left[U^\dagger(t, t_0)\, U(t, t_0)\right] = \frac{1}{i\hbar}\left(-U^\dagger(t, t_0)\, HU(t, t_0) + U^\dagger(t, t_0)\, HU(t, t_0)\right) = 0 \tag{207}$$

$$U^\dagger(t_0, t_0)\, U(t_0, t_0) = I \tag{208}$$

$$U^\dagger(t,t_0)\,U(t,t_0) = I \Longrightarrow U^\dagger(t,t_0) = U(t,t_0)^{-1} = U(t_0,t)) \tag{209}$$

Operátorok mátrixeleme (explicit időfüggést megengedve)

$$a_{12}^S(t) = \left\langle \psi_1^S(t)\right| A^S(t) \left|\psi_2^S(t)\right\rangle = \langle\varphi_1| U^\dagger(t,t_0)\,A^S(t)\,U(t,t_0)\,|\varphi_2\rangle \tag{210}$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}a_{12}^S(t) &= -\frac{1}{i\hbar}\left\langle \psi_1^S(t)\right| H^S A^S(t)\left|\psi_2^S(t)\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\left\langle \psi_1^S(t)\right| A^S(t)\,H^S\left|\psi_2^S(t)\right\rangle + \left\langle \psi_1^S(t)\right| \partial_t A^S(t)\left|\psi_2^S(t)\right\rangle \\ &= \left\langle \psi_1^S(t)\right| -\frac{1}{i\hbar}\left[H^S, A^S(t)\right] + \partial_t A^S(t)\left|\psi_2^S(t)\right\rangle \end{aligned} \tag{211}$$

5.2. Heisenberg kép

Operátorok és hullámfüggvény:

$$A^H(t) = U^\dagger(t,t_0)\,A^S(t)\,U(t,t_0) \tag{212}$$

$$\psi^H(t) = U^\dagger(t,t_0)\,\psi^S(t) = \psi^S(t_0) = \varphi \tag{213}$$

Operátorok mozgásegyenlete:

$$\underline{\frac{d}{dt}A^H(t)} = \frac{1}{i\hbar}\left(-U^\dagger(t,t_0)\,H^S A^S(t)\,U(t,t_0) + U^\dagger(t,t_0)\,A^S(t)\,H^S U(t,t_0)\right) + U^\dagger(t,t_0)\,\partial_t A^S(t)\,U(t,t_0) \tag{214}$$

$$\underline{= -\frac{1}{i\hbar}\left[H^H(t), A^H(t)\right] + \partial_t A^H(t)} \tag{215}$$

ahol

$$H^H(t) = U^\dagger(t,t_0)\,H^S U(t,t_0) \tag{216}$$

$$\partial_t A^H(t) = U^\dagger(t,t_0)\,\partial_t A^S(t)\,U(t,t_0) \tag{217}$$

Hamilton operátor időfüggése:

$$\frac{d}{dt}H^H(t) = \frac{1}{i\hbar}\left(-U^\dagger(t,t_0)\left(H^S\right)^2 U(t,t_0) + U^\dagger(t,t_0)\left(H^S\right)^2 U(t,t_0)\right) = 0 \tag{218}$$

$$\underline{H^H(t) = H^S} \tag{219}$$

Operátorok mátrixeleme:

$$a_{12}^H(t) = \left\langle \psi_1^H\right| A^H(t)\left|\psi_2^H\right\rangle = \left\langle \psi_1^S(t)\right| A^S(t)\left|\psi_2^S(t)\right\rangle = a_{12}^S(t) \tag{220}$$

$$\frac{d}{dt}a_{12}^H(t) = \left\langle \psi_1^H\right| -\frac{1}{i\hbar}\left[H^H(t), A^H(t)\right] + \partial_t A^H(t)\left|\psi_2^H\right\rangle \tag{221}$$

5.3. Dirac (kölcsönhatási) kép

Időfüggő perturbáció

$$H^S(t) = H_0^S + V^S(t) \tag{222}$$

Operátorok a Dirac képben

$$U(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H_0^S (t-t_0)} \tag{223}$$

$$\underline{A^D(t) = U^\dagger(t,t_0)\, A^S(t)\, U(t,t_0)} \tag{224}$$

Az operátorok mozgásegyenlete

$$\frac{d}{dt} A^D(t) = -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger(t,t_0)\, H_0^S A^S(t)\, U(t,t_0) + \frac{1}{i\hbar} U^\dagger(t,t_0)\, A^S(t)\, H_0^S U(t,t_0) + U^\dagger(t,t_0)\, \partial_t A^S(t)\, U(t,t_0) \tag{225}$$

$$= -\frac{1}{i\hbar} \left[H_0^D(t), A^D(t)\right] + U^\dagger(t,t_0)\, \partial_t A^S(t)\, U(t,t_0) \tag{226}$$

$$\frac{d}{dt} H_0^D(t) = 0 \Longrightarrow H_0^D(t) = H_0^S = H_0 \tag{227}$$

$$\underline{\frac{d}{dt} A^D(t) = -\frac{1}{i\hbar} \left[H_0, A^D(t)\right] + \partial_t A^D(t)} \tag{228}$$

$$\partial_t A^D(t) = U^\dagger(t,t_0)\, \partial_t A^S(t)\, U(t,t_0) \tag{229}$$

Állapotfüggvények a Dirac képben

$$\underline{\psi^D(t) = U^\dagger(t,t_0)\, \psi^S(t)} \tag{230}$$

$$\psi^D(t_0) = \psi^S(t_0) = \varphi \tag{231}$$

Mozgásegyenlet

$$\underline{i\hbar \partial_t \psi^D(t)} = i\hbar \partial_t U^\dagger(t,t_0)\, \psi^S(t) + i\hbar U^\dagger(t,t_0)\, \partial_t \psi^S(t) \tag{232}$$

$$= -U^\dagger(t,t_0)\, H_0 \psi^S(t) + U^\dagger(t,t_0) \left(H_0 + V^S(t)\right) \psi^S(t) \tag{233}$$

$$= U^\dagger(t,t_0)\, V^S(t)\, \psi^S(t) = \underline{V^D(t)\, \psi^D(t)} \tag{234}$$

ahol

$$V^D(t) = U^\dagger(t,t_0)\, V^S(t)\, U(t,t_0) \tag{235}$$

Operátorok mátrixelemeinek időfüggése:

$$a_{12}(t) = \left\langle \psi_1^D(t) \right| A^D(t) \left| \psi_2^D(t) \right\rangle \tag{236}$$

$$\frac{d}{dt} a_{12}(t) = -\frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi_1^D(t) \right| V^D(t)\, A^D(t) \left| \psi_2^D(t) \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi_1^D(t) \right| A^D(t)\, V^D(t) \left| \psi_2^D(t) \right\rangle \tag{237}$$

$$- \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi_1^D(t) \right| \left[H_0, A^D(t)\right] \left| \psi_2^D(t) \right\rangle + \left\langle \psi_1^D(t) \right| \partial_t A^D(t) \left| \psi_2^D(t) \right\rangle \tag{238}$$

$$= -\frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi_1^D(t) \right| \left[H^D(t), A^D(t)\right] \left| \psi_2^D(t) \right\rangle + \left\langle \psi_1^D(t) \right| \partial_t A^D(t) \left| \psi_2^D(t) \right\rangle \tag{239}$$

A hullámfüggvény időfejlődését leíró operátor:

$$\underline{\psi^D(t) = U^D(t,t_0)\,\psi^D(t_0) = U^D(t,t_0)\,\varphi} \tag{240}$$

$$U^D(t_0,t_0) = I \tag{241}$$

$$\partial_t \psi^D(t) = -\frac{i}{\hbar} V^D(t)\,\psi^D(t) \tag{242}$$

$$\Downarrow$$

$$\underline{\frac{d}{dt} U^D(t,t_0) = -\frac{i}{\hbar} V^D(t)\,U^D(t,t_0)} \tag{243}$$

$$\Downarrow$$

$$\underline{U^D(t,t_0) = I - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V^D(t')\,U^D(t',t_0)\,dt'} \tag{244}$$

Megoldás:

$$\underline{U^D(t,t_0)} = \sum_{k=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k\, V^D(t_1)\,V^D(t_2)\ldots V^D(t_k) \tag{245}$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t} dt_k\, \mathcal{T}\left[V^D(t_1)\,V^D(t_2)\ldots V^D(t_k)\right] \tag{246}$$

$$\underline{\doteqdot \mathcal{T}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1 V^D(t_1)\right)} \tag{247}$$

ahol az operátorok időrendezett szorzata:

$$\mathcal{T}\left[V^D(t_1)\,V^D(t_2)\ldots V^D(t_k)\right] = V^D(t_{i_1})\,V^D(t_{i_2})\ldots V^D(t_{i_k}) \tag{248}$$

$$t_{i_l} \in \{t_1, t_2, \ldots, t_k\} \;\; (l = 1, 2, \ldots, k) \tag{249}$$

$$t_{i_1} > t_{i_2} > t_{i_3} \ldots > t_{k-1} > t_k \tag{250}$$

Bizonyítás:

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2\, \mathcal{T} f(t_1,t_2) = \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, f(t_1,t_2) + \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1\, f(t_2,t_1) = 2\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, f(t_1,t_2) \tag{251}$$

$$\begin{aligned}
\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t} dt_3 \mathcal{T} f(t_1,t_2,t_3) &= \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3\, f(t_1,t_2,t_3) + \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_3 \int_{t_0}^{t_3} dt_2\, f(t_1,t_3,t_2) \\
&+ \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_3\, f(t_2,t_1,t_3) + \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 \int_{t_0}^{t_3} dt_1\, f(t_2,t_3,t_1) \\
&+ \int_{t_0}^{t} dt_3 \int_{t_0}^{t_3} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_3\, f(t_3,t_1,t_2) + \int_{t_0}^{t} dt_3 \int_{t_0}^{t_3} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1\, f(t_3,t_2,t_1) \\
&= 6\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3\, f(t_1,t_2,t_3)
\end{aligned} \tag{252}$$

Teljes indukciós logikával, ha feltételezzük, hogy $k \in \mathbb{N}$:

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t} dt_k \, \mathcal{T} f(t_1, t_2 \ldots, t_k) = k! \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k \, f(t_1, t_2 \ldots, t_k) \tag{253}$$

akkor

$$\begin{aligned}
&\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t} dt_{k+1} \, \mathcal{T} f(t_1, t_2 \ldots, t_{k+1}) = \sum_{i=1,k+1} \int_{t_0}^{t} dt_i \left(\prod_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^{k} \int_{t_0}^{t_i} dt_j \right) \mathcal{T} f(t_1, t_2, \ldots, t_i, \ldots t_{k+1}) \\
&= k! \sum_{i=1,k+1} \int_{t_0}^{t} dt_i \int_{t_0}^{t_i} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_{i-2}} dt_{i-1} \int_{t_0}^{t_{i-1}} dt_{i+1} \ldots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_{k+1} \, f(t_i, t_1, t_2, \ldots, t_{i-1}, t_{i+1}, \ldots, t_{k+1}) \\
&= (k+1)! \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 \ldots \int_{t_0}^{t_{i-2}} dt_{i-1} \int_{t_0}^{t_{i-1}} dt_{i+1} \ldots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_{k+1} \, f(t_1, t_2, t_3, \ldots, t_i, t_{i+1}, \ldots, t_{k+1})
\end{aligned} \tag{254}$$

ahol az utolsó lépésben az indexeket az alábbi módon cseréltük át:

$$i \to 1, 1 \to 2, 2 \to 3, \ldots, i-1 \to i \tag{255}$$

Egy kicsit egyszerűbb érvelés: A (253) egyenlet baloldalán szereplő integrálban az integrálási tartományt $k!$ részre bonthatjuk, ahol a $t_1, t_2 \ldots, t_k$ változók határozottan rendezettek (a legkisebb változót k-féleképpen választhatjuk ki, az utána következőt $k-1$-féleképpen stb.) A $k!$ integrálban a változókat célszerűen átnevezve látjuk, hogy azok mindegyike a jobboldalon álló integrállal egyezik meg.

Kapcsolat az időfüggő perturbációszámítással:

$$U^{D(1)}(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} V^D(t') \, dt' = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} e^{\frac{i}{\hbar} H_0^S (t'-t_0)} V^S(t') \, e^{-\frac{i}{\hbar} H_0^S (t'-t_0)} dt' \tag{256}$$

$$\psi^{D(1)}(t) = |\varphi\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} e^{\frac{i}{\hbar} H_0^S (t'-t_0)} V^S(t') \, e^{-\frac{i}{\hbar} H_0^S (t'-t_0)} \varphi \, dt' \tag{257}$$

Az állapotfüggvény Schrödinger képben:

$$\psi^{S(1)}(t) = U(t, t_0) \varphi - \frac{i}{\hbar} U(t, t_0) \int_{t_0}^{t} e^{\frac{i}{\hbar} H_0^S (t'-t_0)} V^S(t') \, e^{-\frac{i}{\hbar} H_0^S (t'-t_0)} \varphi \, dt' \tag{258}$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar} H_0^S (t-t_0)} \varphi - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0^S (t-t')} V^S(t') \, e^{-\frac{i}{\hbar} H_0^S (t'-t_0)} \varphi \, dt' \tag{259}$$

t_0-ban H_0^S egy sajátállapotából indulunk:

$$H_0^S = \sum_n \varepsilon_n |n\rangle \langle n| \tag{260}$$

$$\psi(t_0) = \varphi = |k\rangle \tag{261}$$

$$\psi^{S(1)}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k(t-t_0)}|k\rangle - \frac{i}{\hbar}\sum_n \int_{t_0}^t e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n(t-t')}|n\rangle\langle n|V^S(t')|k\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k(t'-t_0)}dt' \tag{262}$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k(t-t_0)}|k\rangle - \frac{i}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k t_0}\sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}\,|n\rangle\int_{t_0}^t e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_n-\varepsilon_k)t'}\langle n|V^S(t')|k\rangle\,dt' \tag{263}$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k t_0}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k t}|k\rangle - \frac{i}{\hbar}\sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}\,|n\rangle\int_{t_0}^t e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_n-\varepsilon_k)t'}\langle n|V^S(t')|k\rangle\,dt'\right) \tag{264}$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k t_0}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k t}\left[1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t V^S_{kk}(t')\,dt'\right]|k\rangle - \frac{i}{\hbar}\sum_{n(\neq k)} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}\,|n\rangle\int_{t_0}^t e^{i\omega_{nk}t'}V^S_{nk}(t')\,dt'\right) \tag{265}$$

$$\omega_{nk} = \frac{\varepsilon_n-\varepsilon_k}{\hbar} \tag{266}$$

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

$$\psi^{S(1)}(t) = \sum_n c_n^{(1)}(t)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}\,|n\rangle \tag{267}$$

ahol

$$c_k^{(1)}(t) = 1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t V^S_{kk}(t')\,dt' \tag{268}$$

és $n \neq k$ esetben

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{nk}t'}V^S_{nk}(t')\,dt'\;. \tag{269}$$

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

6. Adiabatikus időfejlődés

A Hamilton operátor paraméteres időfüggése a Schrödinger képben:

$$H(t) = H(R(t)) \tag{270}$$

ahol R egy többdimenziós valós paramétertér eleme.
Paraméteres sajátállapotok és sajátenergiák:

$$H(R)\,\varphi_m(R) = E_m(R)\,\varphi_m(R) \tag{271}$$

$$\langle \varphi_n(R)\,|\varphi_m(R)\rangle = \delta_{nm} \tag{272}$$

A sajátállapot paraméteres időfüggése:

$$\varphi_n(t) \equiv \varphi_n(R(t)) \tag{273}$$

$$\dot{\varphi}_n(t) \equiv \dot{R}(t)\ \nabla_R \varphi_n(R) \tag{274}$$

$$\langle \varphi_n(t)\,|\dot{\varphi}_m(t)\rangle + \langle \dot{\varphi}_n(t)\,|\varphi_m(t)\rangle = \langle \varphi_n(t)\,|\dot{\varphi}_m(t)\rangle + \langle \varphi_m(t)\,|\dot{\varphi}_n(t)\rangle^* = 0 \tag{275}$$

$$\mathrm{Re}\,\langle \varphi_n(t)\,|\dot{\varphi}_n(t)\rangle = 0 \tag{276}$$

azaz $\langle \varphi_n(R)\,|\nabla_R \varphi_n(R)\rangle$ tisztán imaginárius mennyiség.
A hullámfüggvény időfüggése:

$$i\hbar \partial_t \psi(t) = H(t)\,\psi(t) \tag{277}$$

Kifejtés a paraméteres megoldások szerint:

$$\psi(t) = \sum_m c_m(t)\,\varphi_m(t) \tag{278}$$

A kifejtést behelyettesítve a Schrödinger egyenletbe:

$$i\hbar \sum_m \left(\dot{c}_m(t)\,\varphi_m(t) + c_m(t)\,\dot{\varphi}_m(t)\right) = \sum_m E_m(t)\,c_m(t)\,\varphi_m(t) \tag{279}$$

$$\Downarrow$$

$$\dot{c}_n(t) + \frac{i}{\hbar} E_n(t)\,c_n(t) + \sum_m c_m(t)\,\langle \varphi_n(t)\,|\dot{\varphi}_m(t)\rangle = 0 \tag{280}$$

Kezdeti feltétel:

$$\psi(t_0) = \varphi_k(t_0) \Longrightarrow c_n(t_0) = \delta_{nk} \tag{281}$$

Adiabatikus megoldás: nincs átmenet másik sajátállapotba

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

$$\Downarrow$$

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

$$\Downarrow$$

$$\frac{d}{dt}\ln c_k(t) = -\frac{i}{\hbar}E_k(t) - \langle\varphi_k(t)|\dot{\varphi}_k(t)\rangle \tag{282}$$

$$\Downarrow$$

$$c_k(t) = e^{-id_k(t)}e^{i\gamma_k(t)} \tag{283}$$

ahol $d_k(t)$ a *dinamikus fázis*

$$d_k(t) = \frac{1}{\hbar}\int_{t_0}^{t} E_k(t')\,dt' \tag{284}$$

és $\gamma_k(t)$ a *geometriai fázis*

$$\gamma_k(t) = i\int_{t_0}^{t}\langle\varphi_k(t')|\dot{\varphi}_k(t')\rangle\,dt' \tag{285}$$

$$\Downarrow$$

$$\underline{\psi^{ad}(t) = e^{-id_k(t)}e^{i\gamma_k(t)}\varphi_k(t)} \tag{286}$$

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

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

$$\langle\varphi_k(t)|H(t)|\varphi_n(t)\rangle = E_n(t)\langle\varphi_k(t)|\varphi_n(t)\rangle = 0 \tag{287}$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\varphi_k(t)|H(t)|\varphi_n(t)\rangle &= \langle\dot{\varphi}_k(t)|H(t)|\varphi_n(t)\rangle + \left\langle\varphi_k(t)|\dot{H}(t)|\varphi_n(t)\right\rangle + \langle\varphi_k(t)|H(t)|\dot{\varphi}_n(t)\rangle \\ &= E_n(t)\langle\dot{\varphi}_k(t)|\varphi_n(t)\rangle + E_k(t)\langle\varphi_k(t)|\dot{\varphi}_n(t)\rangle + \left\langle\varphi_k(t)|\dot{H}(t)|\varphi_n(t)\right\rangle \\ &= (E_k(t) - E_n(t))\langle\varphi_k(t)|\dot{\varphi}_n(t)\rangle + \left\langle\varphi_k(t)|\dot{H}(t)|\varphi_n(t)\right\rangle \end{aligned} \tag{288}$$

$$\Downarrow$$

$$\langle\varphi_k(t)|\dot{\varphi}_n(t)\rangle = \frac{\left\langle\varphi_k(t)|\dot{H}(t)|\varphi_n(t)\right\rangle}{E_n(t) - E_k(t)} \to 0 \tag{289}$$

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

$$\left|\frac{\left\langle\varphi_k(t)|\dot{H}(t)|\varphi_n(t)\right\rangle}{E_n(t) - E_k(t)}\right| \ll |\omega_{kn}(t)| = \frac{1}{\hbar}|E_n(t) - E_k(t)| \tag{290}$$

azaz

$$\underline{\hbar\left|\left\langle\varphi_k(t)|\dot{H}(t)|\varphi_n(t)\right\rangle\right| \ll (E_n(t) - E_k(t))^2} \tag{291}$$

Vizsgáljuk meg a geometriai fázist! A (276) egyenletből nyilvánvaló, hogy $\gamma_k(t) \in \mathbb{R}$. Másrészt,

$$\langle\varphi_k(t)|\dot{\varphi}_k(t)\rangle \equiv \dot{R}(t)\,\langle\varphi_k(R(t))|\nabla_R\varphi_k(R(t))\rangle \tag{292}$$

amiből

$$\gamma_k(t) = i\int_{t_0}^{t} \langle \varphi_k(t') | \dot{\varphi}_k(t') \rangle \, dt' = \int_{t_0}^{t} \langle \varphi_k(R(t')) | \nabla_R \varphi_k(R(t')) \rangle \, \dot{R}(t') \, dt' \tag{293}$$

$$= i\int_{R(t_0)}^{R(t)} \langle \varphi_k(R') | \nabla_{R'} \varphi_k(R') \rangle \, dR' \tag{294}$$

tehát a geometriai fázis az

$$A_k(R) = i \langle \varphi_k(R) | \nabla_R \varphi_k(R) \rangle \tag{295}$$

Berry-féle vektorpotenciál paramétertérben vett vonalintegráljával fejezhető ki:

$$\underline{\gamma_k(t) = \int_{R(t_0)}^{R(t)} A_k(R') \, dR' \, .} \tag{296}$$

6.1. Mértéktranszformáció

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

$$\widetilde{\varphi}_k(R) = e^{i\alpha(R)} \varphi_k(R) \tag{297}$$

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

$$\widetilde{A}_k(R) = i \langle \widetilde{\varphi}_k(R) | \nabla_R \widetilde{\varphi}_k(R) \rangle = A_k(R) - \nabla_R \alpha(R) \ , \tag{298}$$

ami igazolja a vektorpotenciál elnevezést. A geometriai fázis transzformációja:

$$\widetilde{\gamma}_k(t) = \int_{R(t_0)}^{R(t)} \widetilde{A}_k(R') \, dR' = \gamma_k(t) - \alpha(R(t)) + \alpha(R(t_0)) \ , \tag{299}$$

így a (286) adiabatikus hullámfüggvény transzformációja:

$$\widetilde{\psi}^{ad}(t) = e^{-id_k(t)} e^{i\widetilde{\gamma}_k(t)} \widetilde{\varphi}_k(t) = e^{-id_k(t)} e^{i\gamma_k(t)} e^{-i\alpha(R(t))} e^{i\alpha(R(t_0))} \widetilde{\varphi}_k(t)$$

$$= e^{-id_k(t)} e^{i\gamma_k(t)} \varphi_k(t) = \psi^{ad}(t) \tag{300}$$

azaz az adiabatikus hullámfüggvény invariáns a bázisfüggvények mértéktranszformációjára.

Gondolhatnánk azt, hogy

$$\alpha(R(t)) = \gamma_k(t) \tag{301}$$

választással a gemetriai fázis zérussá tehető:

$$\widetilde{\gamma}_k(t) \equiv 0 \tag{302}$$

$$\Downarrow$$

$$\widetilde{\psi}^{ad}(t) = e^{-id_k(t)} \widetilde{\varphi}_k(t) \ , \tag{303}$$

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

6.2. Ciklikus mozgás

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

$$R(t_0+T)=R(t_0)\ . \tag{304}$$

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

$$e^{i\alpha(R(t_0+T))}=e^{i\alpha(R(t_0))} \tag{305}$$

kell, hogy teljesüljön, amiből

$$\alpha(R(t_0+T))=\alpha(R(t_0))+2\pi k \quad (k\in\mathbb{Z}) \tag{306}$$

és a (301) mértékválasztás miatt

$$\widetilde{\gamma}_k(t_0+T)=\gamma_k(t_0+T)-\alpha(R(t_0+T))+\alpha(R(t_0))=\gamma_k(t_0+T)+2\pi k \tag{307}$$

következik. A mértéktranszformált adiabatikus hullámfüggvény:

$$\begin{aligned}\widetilde{\psi}^{ad}(t_0+T)&=e^{-id_k(t_0+T)}e^{i\widetilde{\gamma}_k(t_0+T)}\widetilde{\varphi}_k(t_0+T)=e^{-id_k(t_0+T)}e^{i\gamma_k(t_0+T)}\widetilde{\varphi}_k(t_0+T)\\&=e^{-id_k(t_0+T)}e^{i\gamma_k(t_0+T)}\widetilde{\varphi}_k(t_0)=e^{-id_k(t_0+T)}e^{i\gamma_k(t_0+T)}\,\widetilde{\psi}^{ad}(t_0)\end{aligned} \tag{308}$$

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

$$\gamma_k(\mathcal{C})=\oint_{\mathcal{C}}A_k(R)\,dR+2\pi k \tag{309}$$

amit *Berry-fázisnak* nevezünk.

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

$$\gamma_k(\mathcal{C})=\int_{\mathcal{S}}\overrightarrow{B}_k(\overrightarrow{R})d^2S+2\pi k \tag{310}$$

alakban, ahol a felületi integrált a $\mathcal{C}$ görbe által határolt $\mathcal{S}$ felületre végezzük el és a

$$\overrightarrow{B}_k(\overrightarrow{R})=\nabla_{\overrightarrow{R}}\times\overrightarrow{A}_k(\overrightarrow{R}) \tag{311}$$

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

$$\widetilde{\overrightarrow{B}}_k(\overrightarrow{R})=\nabla_{\overrightarrow{R}}\times\widetilde{\overrightarrow{A}}_k(\overrightarrow{R})=\nabla_{\overrightarrow{R}}\times\overrightarrow{A}_k(\overrightarrow{R})-\underbrace{\nabla_{\overrightarrow{R}}\times\nabla_{\overrightarrow{R}}\alpha(\overrightarrow{R})}_{=0}=\overrightarrow{B}_k(\overrightarrow{R})\,. \tag{312}$$

Továbbá:

$$\overrightarrow{B}_k(\overrightarrow{R})=i\,\nabla_{\overrightarrow{R}}\times\langle\varphi_k(\overrightarrow{R})|\nabla_{\overrightarrow{R}}\varphi_k(\overrightarrow{R})\rangle=i\langle\nabla_{\overrightarrow{R}}\varphi_k(\overrightarrow{R})|\times\nabla_{\overrightarrow{R}}\varphi_k(\overrightarrow{R})\rangle \tag{313}$$

azaz

$$B_k^\alpha(\overrightarrow{R})=i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\langle\partial_\beta\varphi_k(\overrightarrow{R})|\partial_\gamma\varphi_k(\overrightarrow{R})\rangle=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}F_k^{\beta\gamma}(\overrightarrow{R})\,, \tag{314}$$

ahol

$$F_k^{\beta\gamma}(\overrightarrow{R}) = -\,\mathrm{Im}\langle \partial_\beta \varphi_k(\overrightarrow{R})|\partial_\gamma \varphi_k(\overrightarrow{R})\rangle \tag{315}$$

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

$$F_k^{\beta\gamma}(\overrightarrow{R}) = -\,\mathrm{Im}\sum_{n(\neq k)} \langle \partial_\beta \varphi_k(\overrightarrow{R})|\varphi_n(\overrightarrow{R})\rangle\langle \varphi_n(\overrightarrow{R})|\partial_\gamma \varphi_k(\overrightarrow{R})\rangle \tag{316}$$

$$= -\,\mathrm{Im}\sum_{n(\neq k)} \frac{\langle \varphi_k(\overrightarrow{R})|\partial_\beta H(\overrightarrow{R})|\varphi_n(\overrightarrow{R})\rangle\langle \varphi_n(\overrightarrow{R})|\partial_\beta H(\overrightarrow{R})|\varphi_k(\overrightarrow{R})\rangle}{\left(E_n(\overrightarrow{R}) - E_k(\overrightarrow{R})\right)^2}\,. \tag{317}$$

Innen kapjuk a Berry-görbület számítására alkalmas formulát:

$$\overrightarrow{B}_k(\overrightarrow{R}) = -\,\mathrm{Im}\sum_{n(\neq k)} \frac{\langle \varphi_k(\overrightarrow{R})|\nabla_{\overrightarrow{R}} H(\overrightarrow{R})|\varphi_n(\overrightarrow{R})\rangle \times \langle \varphi_n(\overrightarrow{R})|\nabla_{\overrightarrow{R}} H(\overrightarrow{R})|\varphi_k(\overrightarrow{R})\rangle}{\left(E_n(\overrightarrow{R}) - E_k(\overrightarrow{R})\right)^2}\,. \tag{318}$$

6.3. Degeneranciák kezelése

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

$$E_m(\overrightarrow{R}^*) = E_k(\overrightarrow{R}^*) = E(\overrightarrow{R}^*) \tag{319}$$

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

$$\left|E_n(\overrightarrow{R}) - E_k(\overrightarrow{R})\right| \gg \left|E_m(\overrightarrow{R}) - E_k(\overrightarrow{R})\right| \quad (n \neq m, k)\ , \tag{320}$$

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

$$\overrightarrow{B}_k(\overrightarrow{R}) \simeq -\,\mathrm{Im}\, \frac{\langle \varphi_k(\overrightarrow{R})|\nabla_{\overrightarrow{R}} H(\overrightarrow{R})|\varphi_m(\overrightarrow{R})\rangle \times \langle \varphi_m(\overrightarrow{R})|\nabla_{\overrightarrow{R}} H(\overrightarrow{R})|\varphi_k(\overrightarrow{R})\rangle}{\left(E_m(\overrightarrow{R}) - E_k(\overrightarrow{R})\right)^2} \tag{321}$$

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

$$E_m(\overrightarrow{0}) = E_k(\overrightarrow{0}) = E(\overrightarrow{0}) \tag{322}$$

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

$$H(\overrightarrow{R}) = \overrightarrow{\sigma} \cdot \mathbf{C}\overrightarrow{R} \tag{323}$$

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

$$H(\overrightarrow{R}') = \frac{1}{2}\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{R}' \tag{324}$$

melynek sajátértékei

$$E_\pm(\overrightarrow{R}') = \pm\frac{R'}{2}. \tag{325}$$

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

$$|\varphi_+(\overrightarrow{R}')\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \ |\varphi_-(\overrightarrow{R}')\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{326}$$

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

$$\langle\varphi_-(\overrightarrow{R}')|\nabla_{\overrightarrow{R}'} H(\overrightarrow{R}')|\varphi_+(\overrightarrow{R}')\rangle = \frac{1}{2}\langle\varphi_-(\overrightarrow{R}')|\overrightarrow{\sigma}|\varphi_+(\overrightarrow{R}')\rangle = \frac{1}{2}(1,i,0) \tag{327}$$

$$\langle\varphi_+(\overrightarrow{R}')|\nabla_{\overrightarrow{R}'} H(\overrightarrow{R}')|\varphi_-(\overrightarrow{R}')\rangle = \frac{1}{2}\langle\varphi_+(\overrightarrow{R}')|\overrightarrow{\sigma}|\varphi_-(\overrightarrow{R}')\rangle = \frac{1}{2}(1,-i,0) \tag{328}$$

és

$$\overrightarrow{B}_+(\overrightarrow{R}') = -\frac{1}{4R'^2}\,\mathrm{Im}\,(1,-i,0)\times(1,i,0) = -\frac{1}{2R'^2}(0,0,1) = -\frac{\overrightarrow{e}'_z}{2R'^2} \tag{329}$$

A koordinátarendszert visszaforgatva:

$$\overrightarrow{B}_+(\overrightarrow{R}') = -\frac{\overrightarrow{R}'}{2R'^3} = -\overrightarrow{B}_-(\overrightarrow{R}') \tag{330}$$

a paramétertérben egy $-\frac{1}{2}$ erősségű mágneses monopólus terének felel meg.

A Berry-fázis egy a degeneráció-pont közelében $\mathcal{C}$ zárt görbén történő ciklikus mozgás esetén:

$$\gamma_+(\mathcal{C}) = -\int_{\mathcal{S}} \frac{\overrightarrow{R}'}{2R'^3} d^2S' = -\int_{\mathcal{S}} \frac{\overrightarrow{R}'}{2R'^3}\frac{\overrightarrow{R}'}{R'} R'^2 d\Omega = -\frac{1}{2}\Omega(\mathcal{C}) \tag{331}$$

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

6.4. Spin mágneses térben

Legyen a Hamilton operátor

$$H\left(\overrightarrow{R}(t)\right) = \frac{g\mu_B}{\hbar}\overrightarrow{S}\,\overrightarrow{R}(t) \tag{332}$$

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

$$E_m(\overrightarrow{R}) = g\mu_B m R \tag{333}$$

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

$$\overrightarrow{B}_m(\overrightarrow{R}) = -\frac{1}{\hbar^2}\,\mathrm{Im}\sum_{n(\neq m)} \frac{\langle m|\overrightarrow{S}|n\rangle \times \langle n|\overrightarrow{S}|m\rangle}{R^2\,(n-m)^2} \tag{334}$$

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

$$\overrightarrow{S}\,\overrightarrow{R} = (O\overrightarrow{S})(O\overrightarrow{R}) = (O\overrightarrow{S})\,(0,0,R) \tag{335}$$

valamint

$$O\overrightarrow{S} = U^{-1}\overrightarrow{S}U \tag{336}$$

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

$$H(\overrightarrow{R}) = U^{-1} H'(\overrightarrow{R}) U \tag{337}$$

$$H'(\overrightarrow{R}) = \frac{g\mu_B}{\hbar} S_z R\,, \tag{338}$$

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

$$H'(\overrightarrow{R})\,|m\rangle' = E_m(R)\,|m\rangle' \tag{339}$$

$$\overrightarrow{S}^2\,|m\rangle' = \hbar^2 s(s+1)\,|m\rangle' \tag{340}$$

$$S_z\,|m\rangle' = \hbar m_s\,|m\rangle' \tag{341}$$

$$S_\pm\,|m\rangle' = \hbar\sqrt{s(s+1) - m(m\pm 1)}\,|m\pm 1\rangle'\ . \tag{342}$$

Innen megkapjuk az eredeti Hamilton.operátor sajátállapotait:

$$U H(\overrightarrow{R}) U^{-1}\,|m\rangle' = E_m(R)\,|m\rangle' \tag{343}$$

$$\Downarrow$$

$$|m\rangle = U^{-1}\,|m\rangle'\ . \tag{344}$$

Ekkor

$$\overrightarrow{B}_m(\overrightarrow{R}) = -\frac{1}{\hbar^2}\,\mathrm{Im}\sum_{n(\neq m)} \frac{\langle m|\overrightarrow{S}|n\rangle \times \langle n|\overrightarrow{S}|m\rangle}{R^2(n-m)^2} = -\frac{1}{\hbar^2}\,\mathrm{Im}\sum_{n(\neq m)} \frac{{}'\langle m|U\overrightarrow{S}U^{-1}|n\rangle' \times {}'\langle n|U\overrightarrow{S}U^{-1}|m\rangle'}{R^2(n-m)^2} \tag{345}$$

$$= -\frac{1}{\hbar^2}\,\mathrm{Im}\sum_{n(\neq m)} \frac{{}'\langle m|O^{-1}\overrightarrow{S}|n\rangle' \times {}'\langle n|O^{-1}\overrightarrow{S}|m\rangle'}{R^2(n-m)^2} = O^{-1}\overrightarrow{B}'_m(R) \tag{346}$$

ahol

$$\overrightarrow{B}'_m(R) = -\frac{1}{\hbar^2}\,\mathrm{Im}\sum_{n(\neq m)} \frac{{}'\langle m|\overrightarrow{S}|n\rangle' \times {}'\langle n|\overrightarrow{S}|m\rangle'}{R^2(n-m)^2}\,. \tag{347}$$

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

$$\overrightarrow{B}'_m(R) = (0, 0, B'^z_m(R)) \tag{348}$$

ahol

$$\begin{aligned} B'^z_m(R) = -\frac{1}{\hbar^2 R^2}\,\mathrm{Im}\big\{ &{}'\langle m|S_x|m+1\rangle'\,{}'\langle m+1|S_y|m\rangle' - {}'\langle m|S_y|m+1\rangle'\,{}'\langle m+1|S_x|m\rangle' \\ &+ {}'\langle m|S_x|m-1\rangle'\,{}'\langle m-1|S_y|m\rangle' - {}'\langle m|S_y|m-1\rangle'\,{}'\langle m-1|S_x|m\rangle'\big\} \end{aligned} \tag{349}$$

$$= -\frac{1}{R^2}\,\mathrm{Im}\,\frac{1}{4i}\,\{2s(s+1) - 2m(m+1) - 2s(s+1) + 2m(m-1)\} \tag{350}$$

$$= -\frac{m}{R^2} \tag{351}$$

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

$$\overrightarrow{B}_m(\overrightarrow{R}) = -m\frac{\overrightarrow{R}}{R^3} \tag{352}$$

és a Berry-fázisra:

$$\gamma_m(\mathcal{C}) = \oint \overrightarrow{B}_m(\overrightarrow{R})\, d^2S = -m\,\Omega(\mathcal{C})\ . \tag{353}$$

7. Mozgás elektromágneses térben

A relativisztikus Hamilton függvény

$$H\left(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{p}\right) = \sqrt{m^2c^4 + c^2\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right)^2} + V \tag{354}$$

Nem-relativisztikus közelítésben:

$$H = \frac{\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right)^2}{2m} + V \quad . \tag{355}$$

ahol $\overrightarrow{p}$ a kanonikus impulzus és

$$\overrightarrow{K} = \overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A} = m\overrightarrow{v} \tag{356}$$

a *kinetikus impulzus.*

7.1. A kinetikus impulzus csererelációi

A koordináta és kanonikus impulzus közötti felcserélési reláció

$$[p_i, x_j] = \frac{\hbar}{i}\delta_{ij} \tag{357}$$

alapján, koordináta reprezentációban megtartjuk a

$$\overrightarrow{p} = \frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla} \tag{358}$$

definíciót. Következésképpen:

$$\overrightarrow{K} = \frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla} - q\overrightarrow{A} \quad . \tag{359}$$

A kinetikus impulzus operátorok felcserélési relációja:

$$\begin{aligned}
[K_i, K_j] &= i\hbar q\left([\partial_i, A_j] + [A_i, \partial_j]\right) \\
&= i\hbar q\left(\partial_i A_j - A_j\partial_i + A_i\partial_j - \partial_j A_i\right) \\
&= i\hbar q\left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right) = i\hbar q\,\varepsilon_{ijk}B_k \quad .
\end{aligned} \tag{360}$$

Innen egyből következik (l. impulzusmomentum operátorok), hogy

$$\overrightarrow{K} \times \overrightarrow{K} = i\hbar q\,\overrightarrow{B} \quad . \tag{361}$$

A kinetikus impulzus és a koordináta operátorok felcserélési relációja:

$$[K_i, x_j] = [p_i, x_j] = \frac{\hbar}{i}\delta_{ij} \quad . \tag{362}$$

7.2. A Schrödinger-egyenlet

A következőkben a

$$H = \frac{\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right)^2}{2m} + V \tag{363}$$

Hamilton operátor koordinátareprezentációbeli alakját vizsgáljuk:

$$\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla} - q\overrightarrow{A}\right)^2 = -\hbar^2\Delta + q^2A^2 - \frac{\hbar q}{i}\left(\overrightarrow{\nabla}\overrightarrow{A} + \overrightarrow{A}\overrightarrow{\nabla}\right) \tag{364}$$

$$\partial_i A_i + A_i\partial_i = \frac{\partial A_i}{\partial x_i} + 2A_i\partial_i \quad \longrightarrow \quad \overrightarrow{\nabla}\overrightarrow{A} + \overrightarrow{A}\overrightarrow{\nabla} = div\overrightarrow{A} + 2\overrightarrow{A}\overrightarrow{\nabla} \quad , \tag{365}$$

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

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V + \frac{q^2}{2m}A^2 + \frac{i\hbar q}{m}\overrightarrow{A}\overrightarrow{\nabla} \quad , \tag{366}$$

azaz az időtől függő Schrödinger egyenlet

$$i\hbar\partial_t\psi\left(\overrightarrow{r},t\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi\left(\overrightarrow{r},t\right) + V\psi\left(\overrightarrow{r},t\right) + \frac{q^2}{2m}A^2\psi\left(\overrightarrow{r},t\right) + \frac{i\hbar q}{m}\overrightarrow{A}\overrightarrow{\nabla}\psi\left(\overrightarrow{r},t\right) \quad . \tag{367}$$

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

7.3. Paramágneses és diamágneses kölcsönhatás

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

$$\overrightarrow{A} = \frac{1}{2}\overrightarrow{B} \times \overrightarrow{r} \tag{368}$$

alakban. Ugyanis

$$div\overrightarrow{A} = \partial_i A_i = \frac{1}{2}\,\varepsilon_{ijk}\,B_j\,\partial_i x_k = \frac{1}{2}\,\varepsilon_{ijk}\,\delta_{ik}\,B_j = \frac{1}{2}\,\varepsilon_{kjk}\,B_j = 0 \tag{369}$$

valamint

$$\begin{aligned}\left(\overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{A}\right)_i &= \frac{1}{2}\,\varepsilon_{ijk}\,\varepsilon_{klm}\,\partial_j\left(B_l\,x_m\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(\delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl}\right)\,\delta_{jm}\,B_l = \frac{1}{2}\left(3B_i - B_i\right) = B_i \quad .\end{aligned} \tag{370}$$

Ezt nevezzük *szimmetrikus mérték*nek. Ekkor az (366) Hamilton operátor utolsó tagja

$$\begin{aligned}\frac{i\hbar q}{m}\overrightarrow{A}\overrightarrow{\nabla} &= \frac{i\hbar q}{2m}\left(\overrightarrow{B} \times \overrightarrow{r}\right)\overrightarrow{\nabla} = \frac{i\hbar q}{2m}\{\left(\overrightarrow{r} \times \overrightarrow{\nabla}\right)\overrightarrow{B} = -\frac{q}{2m}\left(\overrightarrow{r} \times \overrightarrow{p}\right)\overrightarrow{B} \\ &= -\frac{q}{2m}\overrightarrow{L}\overrightarrow{B} = -\overrightarrow{M}_L\overrightarrow{B} \quad ,\end{aligned} \tag{371}$$

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

$$\overrightarrow{M}_L = \frac{q}{2m}\overrightarrow{L} = -\mu_B\frac{\overrightarrow{L}}{\hbar} \quad , \tag{372}$$

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

$$H_{para} = -\left(\overrightarrow{M}_L + 2\overrightarrow{M}_S\right)\overrightarrow{B} = \frac{\mu_B}{\hbar}\left(\overrightarrow{L} + 2\overrightarrow{S}\right)\overrightarrow{B} \quad . \tag{373}$$

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

$$E_{n\ell m_\ell m_s} = E_n^{(0)} + \mu_B (m_\ell + 2m_s) B \quad . \tag{374}$$

Érdekes, hogy a felhasadás mértéke $\mu_B B/\hbar = \frac{qB}{2m}$ éppen az elektrodinamikából ismert Larmour körfrekvencia. A felhasadás tehát a pályamomentum szerint $2\ell + 1$-szeres, a spinmomentum szerint 2-szeres, így $2(2\ell + 1)$ nívó alakulhatna ki. A pályamomentum és spin kvantumszámok fenti kombinációjából azonban kiderül, hogy összesen $2\ell + 3$ nívó alakul ki, melyek közül 4 nívó egyszeresen, $2\ell - 1$ nívó pedig kétszeresen elfajult: $2(2\ell - 1) + 4 = 2(2\ell + 1)$. (Valójában ezt a felhasadást a relativisztikus spin-pálya kölcsönhatás erősen módosíthatja, l. Relativisztikus kvantummechanika). Páratlan rendszámú atomok esetében külső mágneses tér nélkül is megfigyelhető az atomi pályák felhasadása. Ezt *anomális Zeemann efektus*nak hívjuk.

A (366) Hamilton operátor második tagja

$$\frac{q^2}{2m}A^2 = \frac{q^2}{8m}\left(\overrightarrow{B} \times \overrightarrow{r}\right)^2 = \frac{q^2}{8m}\left(r^2B^2 - \left(\overrightarrow{r}\,\overrightarrow{B}\right)^2\right) = \frac{q^2B^2}{8m}\left(x^2 + y^2\right) \tag{375}$$

az ún. *Langevin diamágneses tag*, ahol az utolsó kijezést z irányú mágneses tér esetében kapjuk. Ez a legtöbb esetben elhanyagolható a paramágneses járulékhoz képest. Ugyanis (*kivételesen CGS egységben*):

$$\begin{aligned}\frac{\delta E_{dia}}{\delta E_{para}} &= \frac{e^2B^2}{8mc^2}\left(\frac{eB}{2mc}\right)^{-1}\frac{|\langle x^2 + y^2\rangle|}{|\langle L_z + 2S_z\rangle|} \\ &\simeq \frac{eBa_0^2}{4\hbar c} = \frac{e^2}{4\hbar c}\frac{B}{e/a_0^2} = \frac{1}{4 \cdot 137}\frac{B}{\langle \mathcal{E}\rangle} \quad ,\end{aligned} \tag{376}$$

ami általában igen kicsiny érték. (A fenti becslésben kihasználtuk, hogy $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$ a finomszerkezeti állandó, atomokban $|\langle x^2 + y^2\rangle| \sim a_0^2$, valamint $|\langle L_z + 2S_z\rangle| \sim \hbar$ és $\langle \mathcal{E}\rangle \sim e/a_0^2$ az elektromos térerősség átlagértéke.) Amennyiben viszont a paramágneses tag eltűnik, $\langle L_z + 2S_z\rangle = 0$, a diamágneses járulék dominál. Könnyen kiszámítható az is, hogy az atomi energiaszinteken fellépő paramágneses korrekció $10^{-14}B$ (T) nagyságrendű.

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

$$\begin{aligned}\overrightarrow{\mu}_{dia} &= -\frac{\partial E_{dia}}{\partial \overrightarrow{B}} = -\frac{e^2}{8m}\frac{\partial\left\langle\left(\overrightarrow{B} \times \overrightarrow{r}\right)^2\right\rangle}{\partial \overrightarrow{B}} \\ &= -\frac{e^2}{4m}\left(\langle r^2\rangle\overrightarrow{B} - \left\langle\overrightarrow{r}\left(\overrightarrow{r}\,\overrightarrow{B}\right)\right\rangle\right) \underset{\overrightarrow{B}\parallel\overrightarrow{e}_z}{=} -\frac{e^2B}{4m}\langle x^2 + y^2\rangle\overrightarrow{e}_z \quad ,\end{aligned} \tag{377}$$

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

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

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

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

és

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

7.4. A valószínűségi áramsűrűség elektromágneses tér jelenlétében

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

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \frac{q^2}{2m}\vec{A}^2\psi + \frac{i\hbar q}{2m}\left(div\,\vec{A} + 2\,\vec{A}\,\vec{\nabla}\right)\psi + V\psi + \mu_B\,\vec{B}\,\vec{\sigma}\,\psi \tag{378}$$

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

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \tag{379}$$

a kétkomponensű hullámfüggvény. Komponensenként kiírva

$$i\hbar\partial_t\psi_r = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_r + \frac{q^2}{2m}\vec{A}^2\psi_r + \frac{i\hbar q}{2m}\left(div\,\vec{A} + 2\,\vec{A}\,\vec{\nabla}\right)\psi_r + V\psi_r + \mu_B B_i\,\sigma_i^{rs}\,\psi_s \quad (r=1,2)\ . \tag{380}$$

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

$$-i\hbar\partial_t^*\psi_r = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_r^* + \frac{q^2}{2m}\vec{A}^2\psi_r - \frac{i\hbar q}{2m}\left(div\,\vec{A} + 2\,\vec{A}\,\vec{\nabla}\right)\psi_r^* + V\psi_r^* + \mu_B B_i\,\psi_s^*\sigma_i^{sr} \quad (r=1,2)\ , \tag{381}$$

amit írhatunk a

$$-i\hbar\partial_t\psi^\dagger = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^\dagger + \frac{q^2}{2m}\vec{A}^2\psi^\dagger - \frac{i\hbar q}{2m}\left(div\,\vec{A} + 2\,\vec{A}\,\vec{\nabla}\right)\psi^\dagger + V\psi^\dagger + \mu_B\,\psi^\dagger\vec{B}\,\vec{\sigma} \tag{382}$$

kompakt formában is, ahol

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

A (378) és (382) egyenletek felhasználásával adódik, hogy

$$\begin{aligned} i\hbar\left(\psi^\dagger\partial_t\Psi + \left[\partial_t\psi^\dagger\right]\psi\right) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^\dagger\Delta\psi - \left[\Delta\psi^\dagger\right]\psi\right) \\ &+ \frac{i\hbar q}{mc}\left(\left[\vec{\nabla}\vec{A}\right]\psi^\dagger\psi + \vec{A}\,\psi^\dagger\left[\vec{\nabla}\psi\right] + \vec{A}\left[\vec{\nabla}\psi^\dagger\right]\psi\right) \quad , \end{aligned} \tag{383}$$

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

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

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

illetve

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

a következő kontinuitási egyenlethez jutunk:

$$\partial_t\rho+\overrightarrow{\nabla}\,\overrightarrow{j}=0 \quad , \tag{384}$$

ahol

$$\rho=\psi^\dagger\psi \tag{385}$$

és

$$\overrightarrow{j}=\frac{i\hbar}{2m}\left(\left[\overrightarrow{\nabla}\psi^\dagger\right]\psi-\psi^\dagger\,\overrightarrow{\nabla}\psi\right)-\frac{q}{m}\overrightarrow{A}\,\psi^\dagger\psi \quad . \tag{386}$$

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

$$\overrightarrow{j}=\frac{1}{m}\,\mathrm{Re}\left(\psi^\dagger\overrightarrow{K}\psi\right)=-\frac{i\hbar}{2m}\{\psi^\dagger\left[\overrightarrow{\nabla}\psi\right]-\underbrace{\left(\psi^\dagger\left[\overrightarrow{\nabla}\psi\right]\right)^+}_{=\left[\overrightarrow{\nabla}\psi^\dagger\right]\psi}\}-\frac{q}{m}\overrightarrow{A}\psi^\dagger\psi \quad . \tag{387}$$

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

7.5. Mértéktranszformáció

Az elektromos térerősség

$$\overrightarrow{E}=-\frac{\partial\overrightarrow{A}}{\partial t}-\overrightarrow{\nabla}\phi \tag{388}$$

és a mágneses indukció

$$\overrightarrow{B}=\overrightarrow{\nabla}\times\overrightarrow{A} \tag{389}$$

az

$$\overrightarrow{A}'\left(\overrightarrow{r},t\right)=\overrightarrow{A}\left(\overrightarrow{r},t\right)+\overrightarrow{\nabla}\Lambda\left(\overrightarrow{r},t\right) \qquad \phi'\left(\overrightarrow{r},t\right)=\phi\left(\overrightarrow{r},t\right)-\partial_t\Lambda\left(\overrightarrow{r},t\right) \tag{390}$$

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

$$i\hbar\partial_t\psi\left(\overrightarrow{r},t\right)=\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}-q\overrightarrow{A}\left(\overrightarrow{r},t\right)\right)^2+q\phi\left(\overrightarrow{r},t\right)\right]\psi\left(\overrightarrow{r},t\right) \tag{391}$$

időtől függő Schrödinger egyenlet a mértéktranszformáció hatására a

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi'\left(\overrightarrow{r},t\right)&=\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}-q\overrightarrow{A}'\left(\overrightarrow{r},t\right)\right)^2+q\phi'\left(\overrightarrow{r},t\right)\right]\psi'\left(\overrightarrow{r},t\right)\\ &=\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}-q\overrightarrow{A}\left(\overrightarrow{r},t\right)-q\overrightarrow{\nabla}\Lambda\left(\overrightarrow{r},t\right)\right)^2+q\phi\left(\overrightarrow{r},t\right)-q\partial_t\Lambda\left(\overrightarrow{r},t\right)\right]\psi'\left(\overrightarrow{r},t\right) \end{aligned} \tag{392}$$

alakba megy át.

Állítás:

$$\psi'\left(\vec{r},t\right)=\psi\left(\vec{r},t\right)\exp\left(\frac{iq}{\hbar}\Lambda\left(\vec{r},t\right)\right) \tag{393}$$

Bizonyítás:

A

$$i\hbar\partial_t\left[\exp\left(\frac{iq}{\hbar}\Lambda\left(\vec{r},t\right)\right)\psi\left(\vec{r},t\right)\right]=\exp\left(\frac{iq}{\hbar}\Lambda\left(\vec{r},t\right)\right)\left(i\hbar\partial_t-q\partial_t\Lambda\left(\vec{r},t\right)\right)\Psi\left(\vec{r},t\right) \tag{394}$$

azonosságot behelyettesítve a (392) egyenletbe, majd némi átrendezés után kapjuk, hogy

$$i\hbar\partial_t\psi\left(\vec{r},t\right)=\left[\frac{1}{2m}e^{-\frac{iq}{\hbar}\Lambda\left(\vec{r},t\right)}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}-q\vec{A}\left(\vec{r},t\right)-q\vec{\nabla}\Lambda\left(\vec{r},t\right)\right)^2e^{\frac{iq}{\hbar}\Lambda\left(\vec{r},t\right)}+q\phi\left(\vec{r},t\right)\right]\psi\left(\vec{r},t\right)\ . \tag{395}$$

Felhasználva az

$$e^{-\frac{i}{\hbar}f\left(\vec{r}\right)}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}+g\left(\vec{r}\right)-\vec{\nabla}f\left(\vec{r}\right)\right)e^{\frac{i}{\hbar}f\left(\vec{r}\right)}=\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}+g\left(\vec{r}\right) \tag{396}$$

ill. tetszőleges $n\in\mathbb{N}$ esetén az

$$e^{-\frac{i}{\hbar}f\left(\vec{r}\right)}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}+g\left(\vec{r}\right)-\vec{\nabla}f\left(\vec{r}\right)\right)^ne^{\frac{i}{\hbar}f\left(\vec{r}\right)}=\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}+g\left(\vec{r}\right)\right)^n \tag{397}$$

azonosságot, az $f\left(\vec{r}\right)=q\Lambda\left(\vec{r},t\right)$ és $g\left(\vec{r}\right)=-q\vec{A}\left(\vec{r},t\right)$ választással a (391) Schrödinger egyenlethez jutunk.

7.6. Az Aharonov-Bohm effektus

Időben állandó mágneses tér esetén

$$\partial_t\Lambda\left(\vec{r},t\right)=0 \quad \text{és} \quad \phi'\left(\vec{r},t\right)=\phi\left(\vec{r},t\right) \quad . \tag{398}$$

Ugyanakkor

$$\int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}}\vec{A}'\left(\vec{s}\right)d\vec{s}=\int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}}\vec{A}\left(\vec{s}\right)d\vec{s}+\Lambda\left(\vec{r}\right)-\Lambda\left(\vec{r}_0\right) \quad . \tag{399}$$

Zérus mágneses tér esetén megválaszthatjuk a mértéktranszformációt úgy, hogy a vektorpotenciál is zérus legyen,

$$\Lambda\left(\vec{r}\right)=-\int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}}\vec{A}\left(\vec{s}\right)d\vec{s} \quad , \tag{400}$$

ahol $\Lambda\left(\vec{r}_0\right)=0$. Nyilvánvaló, hogy a fenti konstrukció csak rotációmentes vektorpotenciál (azaz zérus mágneses tér) esetén biztosítja a $\Lambda\left(\vec{r}\right)$ egyértelműségét, azaz, hogy az integrál tetszőleges $\vec{r}_0\to\vec{r}$ útvonalra ugyanazt az értéket adja. Ezenfelül fel kell tennünk, hogy a $\vec{B}=0$-val jellemzett tértartomány (jelöljük ezt Ω_0-lal) *egyszeresen összefüggő.* Ha ugyanis Ω_0 körbefog egy olyan tértartományt (Ω_B), ahol $\vec{B}\neq 0$, akkor $\Lambda\left(\vec{r}\right)$ csak a körbeölelt fluxus,

$$\Phi_B=\oint\vec{A}\left(\vec{s}\right)d\vec{s} \tag{401}$$

egészszámszorosáig meghatározott.

Legyen $\overrightarrow{r} \in \Omega_0$ esetén a vektorpotenciál $\overrightarrow{A}(\overrightarrow{r})$, a hullámfüggvényt pedig jelöljük $\psi_A(\overrightarrow{r}, t)$-vel. Amennyiben a vektorpotenciált a fentiek szerint kitranszformáljuk, a hullámfüggvény legyen $\psi_0(\overrightarrow{r}, t)$. Ekkor a hullámfüggvények között fennáll a

$$\psi_0(\overrightarrow{r}, t) = \psi_A(\overrightarrow{r}, t) \exp\left(\frac{iq}{\hbar}\Lambda(\overrightarrow{r})\right) = \psi_A(\overrightarrow{r}, t) \exp\left(-\frac{iq}{\hbar}\int_{\overrightarrow{r}_0}^{\overrightarrow{r}} \overrightarrow{A}(\overrightarrow{s})\, d\overrightarrow{s}\right) \quad , \tag{402}$$

illetve a

$$\psi_A(\overrightarrow{r}, t) = \psi_0(\overrightarrow{r}, t) \exp\left(\frac{iq}{\hbar}\int_{\overrightarrow{r}_0}^{\overrightarrow{r}} \overrightarrow{A}(\overrightarrow{s})\, d\overrightarrow{s}\right) \quad . \tag{403}$$

összefüggés, ami arra utal, hogy a mágneses tér változása a vektorpotenciálon keresztül hat a hullámfüggvényre. Ugyanakkor tudjuk, hogy a mágneses tér (indukció) a mérhető fizikai mennyiség. Másrészt, mivel a hatás a hullámfüggvényben egy fázisfaktorként jelentkezik, nem triviális tény, hogy kísérletileg kimutatható-e a mágneses tér jelenléte a részecske mozgásában (kvantumos viselkedésében) azon tartományban, ahol zérus a mágneses tér (Ω_0).

Az AB kísérlet olyan kétréses elektron interferencia kísérlet, melyben a két rés közötti zárt térrészben, az elrendezésre merőleges irányú mágneses tér (szolenoid tekercs) van. Legyen $\overrightarrow{r}_0$ a forrás helye, $\overrightarrow{r}$ pedig az ernyő egy pontja. Az egzakt kvantummechanikai megoldás helyett az ernyőn kialakuló intenzitás leírására használjuk a rések szelektív letakarásával számítható hullámfüggvények, $\psi_1(\overrightarrow{r}, t)$ és $\psi_2(\overrightarrow{r}, t)$, interferenciáját. Ezt a (Jönsson-féle kétréses elektroninterferencia kísérlet magyarázatánál bevált) 'segédképet' azért kell használnunk, mert így a mágneses tér mentes tértartományok egyszeresen összefüggőek lesznek (nem ölelik át a szolenoid fluxusát) és használható (403) egyenlet. Eszerint a két hullámfüggvény,

$$\psi_{1A}(\overrightarrow{r}, t) = \psi_{10}(\overrightarrow{r}, t) \exp\left(\frac{iq}{\hbar}\int_1 \overrightarrow{A}(\overrightarrow{s})\, d\overrightarrow{s}\right) \tag{404}$$

és

$$\psi_{2A}(\overrightarrow{r}, t) = \psi_{20}(\overrightarrow{r}, t) \exp\left(\frac{iq}{\hbar}\int_2 \overrightarrow{A}(\overrightarrow{s})\, d\overrightarrow{s}\right) \tag{405}$$

alakban írható. A ernyőn ezen hullámfüggvények szuperpozíciójának abszolútérték négyzetével arányos intenzitás jelenik meg,

$$\begin{aligned}
|\psi_A(\overrightarrow{r}, t)|^2 &= \frac{1}{2}\left|\psi_{1A}(\overrightarrow{r}, t) + \psi_{2A}(\overrightarrow{r}, t)\right|^2 \\
&= \frac{1}{2}\left|\psi_{10}(\overrightarrow{r}, t) \exp\left(\frac{iq}{\hbar}\left[\int_1 \overrightarrow{A}(\overrightarrow{s})\, d\overrightarrow{s} - \int_2 \overrightarrow{A}(\overrightarrow{s})\, d\overrightarrow{s}\right]\right) + \psi_{20}(\overrightarrow{r}, t)\right|^2 \\
&= \frac{1}{2}\left|\psi_{10}(\overrightarrow{r}, t) \exp\left(\frac{iq}{\hbar}\oint \overrightarrow{A}(\overrightarrow{s})\, d\overrightarrow{s}\right) + \psi_{20}(\overrightarrow{r}, t)\right|^2 \qquad (406) \\
&= \frac{1}{2}\left|\psi_{10}(\overrightarrow{r}, t) \exp\left(\frac{iq}{\hbar}\Phi_B\right) + \psi_{20}(\overrightarrow{r}, t)\right|^2 \quad . \qquad (407)
\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
I(r) &\sim \frac{1}{2}\left|\exp\left(ik\ell_1 + \frac{iq}{\hbar}\Phi_B\right) + \exp(ik\ell_2)\right|^2 \\
&= \frac{1}{2}\left|1 + \exp\left(i\left[k\ell_1 - k\ell_2 + \frac{q}{\hbar}\Phi_B\right]\right)\right|^2 \\
&= 1 + \cos\left(k\ell_1 - k\ell_2 + \frac{q}{\hbar}\Phi_B\right) \quad , \qquad (408)
\end{aligned}$$

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

$$k\left(\ell_1 - \ell_2\right) - \frac{e}{\hbar}\Phi_B = 2\pi n \longrightarrow \ell_1 - \ell_2 = \lambda\left(n + \frac{\Phi_B}{h/e}\right) = \lambda\left(n + \frac{\Phi_B}{\Phi_0}\right) \quad , \tag{409}$$

ahol $n \in \mathbb{Z}$, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, $\lambda = \frac{h}{mv}$ a de Broglie hullámhossz és $\Phi_0 = h/e = 4.135 \times 10^{-11}\ \mathrm{T\,cm^2}$ az elemi fluxus. Az ernyőn kialakuló vonalak pozíciója tehát a szolenoid mágneses fluxusának változtatásával eltolódik, amit a kísérlet valóban igazolt.

Az Aharonov-Bohm effektus itt közölt magyarázata erősen kvalitatív jellegű. A kísérletben ugyanis mindkét rés nyitva van, tehát a hullámfüggvényt egy nem összefüggő tértartományban kell megkonstruálni. Teljesen nyilvánvalóvá válik ez a probléma akkor, amikor egy síkhullám szórását vizsgáljuk egy áramjárta szolenoid tekercsen. Az ernyőn kialakuló intenzitáskép hasonló függést mutat a Φ_B fluxustól, mint a kétréses interferencia kísérletben, viszont a (403) hullámfüggvény transzformáció nem alkalmazható. Sir Michael V. Berry és mtsi. megmutatták [M.V. Berry és mtsi., *Eur. J. Phys.* **1**, 154 (1980), M.V. Berry, *Eur. J. Phys.* **1**, 240 (1980)], hogy az Ω_0 tartományban megkonstruálható egy egyértékű (egzakt) szórási hullámfüggvény, melynek aszimptotikus alakja jól magyarázza a kísérleti megfigyelést.

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

$$A_\varphi = \frac{\Phi_B}{2\pi r}\ , \ A_r = A_z = 0\ . \tag{410}$$

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

$$H = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{1}{a}\frac{\partial}{\partial\varphi} - qA_\varphi\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{iq}{h}\Phi_B\right)^2 \tag{411}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\frac{\Phi_B}{\Phi_0}\right)^2 \tag{412}$$

alakban írhatjuk. A Schrödinger egyenlet triviális megoldása,

$$E = \frac{\hbar^2 C^2}{2ma^2} \tag{413}$$

$$\psi\left(\varphi\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(i\left[C + \frac{\Phi_B}{\Phi_0}\right]\varphi\right) \tag{414}$$

ahol a *hullámfüggvény egyértékűségét* a

$$C + \frac{\Phi_B}{\Phi_0} = n \in \mathbb{Z} \tag{415}$$

összefüggés biztosítja. A sajátállapot energiája tehát

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(n - \frac{\Phi_B}{\Phi_0}\right)^2\ , \tag{416}$$

a hullámfüggvény pedig

$$\psi_n\left(\varphi\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\varphi}\ . \tag{417}$$

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

$$\psi(E;\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(i\frac{\sqrt{2ma^2E}}{\hbar}\varphi\right) \exp\left(i\frac{\Phi_B}{\Phi_0}\varphi\right) , \tag{418}$$

expliciten megjelenik az AB effektusnál megismert mágneses fázisfaktor.

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

$$\mathcal{E}_r(t) = -\frac{1}{2\pi a}\frac{d\Phi_B(t)}{dt} \tag{419}$$

elektromos teret indukál, melynek következtében a töltött részecskére ható erő

$$F_r(t) = -\frac{q}{2\pi a}\frac{d\Phi_B(t)}{dt} , \tag{420}$$

az energia időbeli változása pedig

$$\frac{dE(t)}{dt} = -\frac{1}{2m}p_r(t)\frac{dp_r(t)}{dt} = -\frac{q}{2\pi am}p_r(t)\frac{d\Phi_B(t)}{dt} \tag{421}$$

$$= -\frac{q}{2\pi am}\sqrt{2mE(t)}\frac{d\Phi_B(t)}{dt} = -\frac{q}{\pi}\sqrt{\frac{E(t)}{2ma^2}}\frac{d\Phi_B(t)}{dt} \tag{422}$$

amiből

$$\frac{dE}{d\Phi_B} = -\frac{q}{\pi}\left(\frac{E}{2ma^2}\right)^{1/2} \tag{423}$$

következik. Ez teljesen összhangban van a sajátállapotok energiájára kapott (416) kifejezéssel. (A fenti gondolatmenet E. Merzbacher, *Am. J. Phys.* **30**, 237 (1962) cikkéből származik.)

7.7. Fluxuskvantálás elsőfajú szupravezetőben

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

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

$$rot\,\overrightarrow{B} = \mu_0\left(\overrightarrow{j} + \varepsilon_0\frac{\partial\overrightarrow{\mathcal{E}}}{\partial t}\right) \tag{424}$$

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

$$\psi(\overrightarrow{r}) = \sqrt{\varrho}e^{i\vartheta(\overrightarrow{r})} \tag{425}$$

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

$$\overrightarrow{j}\left(\overrightarrow{r}\right)=\frac{\hbar q}{m}\left(\overrightarrow{\nabla}\vartheta\left(\overrightarrow{r}\right)-\frac{q}{\hbar}\overrightarrow{A}\left(\overrightarrow{r}\right)\right)\varrho \tag{426}$$

és $\overrightarrow{j}=0$ miatt fennáll, hogy

$$\overrightarrow{\nabla}\vartheta\left(\overrightarrow{r}\right)=\frac{q}{\hbar}\overrightarrow{A}\left(\overrightarrow{r}\right)\ . \tag{427}$$

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

$$\Delta\vartheta=\oint\overrightarrow{\nabla}\vartheta\left(\overrightarrow{s}\right)d\overrightarrow{s}=\frac{q}{\hbar}\oint\overrightarrow{A}\left(\overrightarrow{r}\right)d\overrightarrow{s}=\frac{q}{\hbar}\Phi_B=2\pi n \tag{428}$$

azaz

$$\Phi_B=\frac{h}{q}n\quad . \tag{429}$$

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

7.8. Szabad elektronok mozgása homogén mágneses térben: Landau nívók

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

$$\omega_c=\frac{|q|\,B}{m} \tag{430}$$

körfrekvenciájú körmozgást végez. Mivel ekkor a rendszer energiája

$$E=\frac{1}{2}mR^2\omega_c^2\ , \tag{431}$$

a *Bohr-Sommerfeld kvantál*ási feltétel alapján,

$$\oint L_z d\varphi=2\pi mRv=2\pi mR^2\omega_c=hn\ \Rightarrow\ mR^2\omega_c=n\hbar\ \Rightarrow\ E_n=\frac{1}{2}n\hbar\omega_c\ , \tag{432}$$

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

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

$$\overrightarrow{A}=\left(-\frac{1}{2}By,\frac{1}{2}Bx,0\right)\quad , \tag{433}$$

a kinetikus impulzus pedig

$$\overrightarrow{K}=(K_x,K_y,K_z)=\left(p_x-\frac{eB}{2}y,\ p_y+\frac{eB}{2}x,\ p_z\right) \tag{434}$$

$$=\left(p_x-\frac{m\omega_c}{2}y,\ p_y+\frac{m\omega_c}{2}x,\ p_z\right) \tag{435}$$

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

$$[K_x, K_y] = \frac{\hbar e}{i} B = \frac{\hbar}{i} m\omega_c \tag{436}$$

csererreláció. A

$$H = \frac{1}{2m} \left(K_x^2 + K_y^2 \right) + \frac{p_z^2}{2m} \tag{437}$$

Hamilton operátor sajátfüggvényei,

$$H\psi = E\psi \quad , \tag{438}$$

$$\psi \left(\overrightarrow{r} \right) = \varphi_k \left(x, y \right) e^{ikz} \tag{439}$$

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

$$\frac{1}{2m} \left(K_x^2 + K_y^2 \right) \varphi_k \left(x, y \right) = \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \varphi_k \left(x, y \right) \tag{440}$$

sajátértékegyenletet. Bevezetve az

$$X = \frac{K_y c}{eB} = \frac{K_y}{m\omega_c} \quad \text{és} \quad P = K_x \tag{441}$$

operátorokat, a (436) csererelációból egyrészt következik, hogy

$$[P, X] = \frac{\hbar}{i} \quad , \tag{442}$$

másrészt pedig (440) a

$$\left(\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_c^2 X^2 \right) \varphi_k \left(x, y \right) = \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \varphi_k \left(x, y \right) \tag{443}$$

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

$$a = \sqrt{\frac{m\omega_c}{2\hbar}} \left(X + \frac{i}{m\omega_c} P \right) \tag{444}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2} L_H} \frac{1}{m\omega_c} \left(K_x + iK_y \right) \tag{445}$$

és

$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega_c}{2\hbar}} \left(X - \frac{i}{m\omega_c} P \right) \tag{446}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2} L_H} \frac{1}{m\omega_c} \left(K_x - iK_y \right) \tag{447}$$

léptetőoperátorokat, ahol

$$L_H = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_c}} = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} \tag{448}$$

Behelyettesítve a $\hbar$ és e értékeit,

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

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

$$H = \frac{1}{2} m\omega_c^2 X^2 + \frac{P^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} = \hbar\omega_c \left(a^+ a + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2m} \tag{449}$$

alakot ölti. Következésképpen a sajátenergiák,

$$E = E_{n,k} = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad , \tag{450}$$

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

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

$$\overrightarrow{A} = (-By, 0, 0) \quad , \tag{451}$$

$$\psi_{n,k_x,k_z}(x,y,z) \sim \exp(ik_z z)\exp(ik_x x)\exp\left(-\frac{1}{2L_H^2}\left(y - k_x L_H^2\right)^2\right) H_n\left(\frac{y - k_x L_H^2}{L_H}\right) \quad , \tag{452}$$

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

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

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} m \qquad (m \in \mathbb{N}) \tag{453}$$

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

$$L_H^2 \underbrace{\frac{2\pi}{L_x} M}_{\max k_x} = L_y \longrightarrow M = \frac{L_x L_y}{2\pi L_H^2} = \frac{A\,|q|\,B}{h} = \frac{\Phi}{\Phi_0} \tag{454}$$

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

$$\Phi = 2\pi L_H^2 B = \frac{hB}{m\omega_c} = \frac{h}{e} = \Phi_0 \quad ! \tag{455}$$