

BEVEZETÉS

Klasszikus fizikai kiegészítő

A klasszikus fizikában gyakran találkozunk olyan jelenségekkel, amikor egy "F" fizikai mennyiség a tér minden " \vec{r} " pontjában és bármely "t" időpillanatban valamilyen $F(\vec{r}, t)$ értéket vesz fel. Gondoljunk például egy közegben az anyag sűrűségére, vagy a közeg egy pontjának az elmozdulására, az akár az elektromágneses térre. A célunk ekkor legtöbbször az, hogy meghatározzuk a kérdéses fizikai mennyiséget, mint a hely és az idő függvényét, azaz az $F(\vec{r}, t)$ függvényt. Az ilyen (vektorváltozós skalár) függvények szemléltetésére az ún. színfelületek használjuk. Ez azt jelenti, hogy meghatározzuk a tér azon pontjainak a halmazát, amely pontokban az "F" érték ugyanaz, azaz $F(\vec{r}, t) = F_0$. Ez a térben egy adott "t" időpillanatban egy (vagy több) felület lesz. Az idő múlásával ez a felület változtathatja a helyét és az alakját. Ez szemlélteti a jelenség dinamikáját. Magát a jelenséget adott fizikai hullámok gerjesztésének illetve ezen hullámok terjedésének nevezzük.

A vizsgált reális fizikai rendszerekben a tér egyes pontjaiban megvalósuló fizikai állapotok nem függetlenek egymástól. Ezért terjedhet a hullám a közegben. Ekkor a rendszer dinamikai leírása általában egy (lineáris) hullámegyenlettel történik. Ezt kell megoldanunk az adott kezdeti és peremfeltételek ismeretében (ezek adják meg, hogy milyen módon gerjesztjük. A megoldások matematikai leírására az elkövetkezőkben komplex függvényt fogunk használni. Ennek az az oka, hogy a komplex függvényeknek kellemes matematikai tulajdonságai vannak, amelyek megkönnyítik a velük való számolást. Fizikai tartalma természetesen csak valós mennyiségnek lehet. Ezért mindig meg kell mondanunk azt, hogy az elméleti tárgyalásban használt komplex függvényből hogyan kapunk egy olyan valós függvényt, amely a vizsgált fizikai jelenség leírására szolgál. A klasszikus fizikában legtöbbször ez a komplex függvény valós, vagy képzetes része szokott lenni.

A lehető legegyszerűbb megoldás lehet egy a közegben haladó síkhullám. A síkhullám esetén a szintfelületek síkok lesznek (innen van az elnevezés is). Ezeket a szintfelületeket most "hullámfront(ok)nak" vagy "fázisfelület(ek)nek" is nevezik. Speciális síkhullám az ún. harmonikus síkhullám. Ekkor mind térben, mind pedig időben egy "szinuszos" periodicitást tapasztalunk. A (harmonikus) síkhullámot jellemző adatok az ω körfrekvencia (az időbeli periodicitást megadó mennyiség) és a λ hullámhossz (a térbeli periodicitást megadó mennyiség). Ez utóbbi helyett a \vec{k} hullámszám vektort fogjuk használni, amely megadja a síkhullám terjedésének az irányát is. Ez a vektor ugyanis merőleges a hullámfrontok síkjára. Nagysága pedig a hullámhossz reciprokával arányos. Célszerű. Célszerű olyan Descartes koordináta-rendszerben dolgoznunk, amelyben a síkhullám az x tengely mentén halad, azaz $\vec{k} \equiv (k, 0, 0)$. Ekkor ugyanis a hullám leírására egy egydimenziós $F(x, t)$ hullámfüggvényt lehet használni.

Ha a vizsgált fizikai rendszer "lineáris", akkor különböző ω (kör)frekvenciájú síkhullámok lineáris kombinációja szintén megoldása a hullámegyenletnek. Ezt a megoldást szemléletesen hullámcsomagnak nevezzük akkor, ha az egy térben lokalizált (véges kiterjedésű) (hullám)jelenséget ír le. Az összetevő "k" hullámszámú síkhullámok amplitúdóinak összességét a hullámcsomag " $c(k)$ " spektrumának nevezzük. A matematikai nehézségek elkerülése végett egy olyan hullámcsomagot vizsgálunk meg, amelynek a spektruma "négyzet alakú". Ez azt jelenti, hogy egy k_0 hullámszám $\pm \Delta k$ környezetében lévő minden síkhullámot egyforma " c_0 " amplitúdóval összeadunk. Ez a hullámcsomag a specialitása ellenére már rendelkezik azokkal az általános tulajdonságokkal, amelyekre most rá szeretnénk mutatni. Ha a spektrum elegendően keskeny, akkor az $\omega(k)$ függés a spektrum $k_0 \pm \Delta k$ tartományában lineárisnak tekinthető. Ezzel a közelítéssel a hullámcsomag térbeli alakja egyszerű integrálással megkapható. Az eredményt megvizsgálva azt láthatjuk, hogy minél jobban lokalizált egy hullámcsomag, annál szélesebb spektrummal rendelkezik és viszont. Ez általában (azaz tetszőleges alakú de véges szélességű) spektrum esetén is igaz! A hullámcsomag, mint egységes objektum haladási sebessége az ún. csoportsebesség. Ezt legtöbbször a hullámcsomag egy pontjának (pl. a maximumának) a haladási sebességét jelenti.

A hullámcsomagok harmonikus hullámokra való felbontását, (illetve a hullámcsomag felépítését) "Fourier analízisnek" nevezzük. Az ennek megfelelő matematikai művelet a "Fourier integrál" illetve "Fourier transzformáció".

OROSZ L. Kvantummechanika 3. oldal

A fizika és ezen belül a kvantummechanika is (mint a természettudományok általában) az elméleti modellek és a kísérleti eredmények állandó kölcsönhatásának eredményeképpen fejlődik. Minden elméleti állítás kísérleti igazolást követel és minden kísérleti eredmény elméleti magyarázatot igényel. A "Kísérlet" (azaz a "Valósággal való szembesülés") ebben a kapcsolatrendszerben teljes "vétó"-val rendelkezik. *"A tudomány nagy tragédiája, ahogyan egyetlen rusnya tény lemészárol egy gyönyörű elméletet"* írta Thomas Huxley. A "lemészárolt, gyönyörű elméletek" történetéből valószínűleg egy, a mai fizika könyvnél sokkal érdekesebb és vastagabb könyvet lehetne írni. Bár manapság a feltámadás és a túlélés szép példányaival találkozhatunk az áltudományok művelőinek egyre hangosabb és követelőzőbb táborában. Nem árt, ha odafigyelünk!

A kvantummechanika kialakulását és történeti fejlődését, a kísérleti eredmények (• jelöli) és az elméleti modellek (• jelöli) egymásrahatását a közölt hálódiaagram szemlélteti.

A "régí" kvantummechanika 1900. december 14-én született. Ekkor hangzott el a német Fizikai Társaság ülésén az akkor 42 éves (!) Max Planck előadása, amelynek a címe: "A normálspektrum energia-eloszlási törvényének az elmélete" volt. Ekkor ismertette a fekete test hőmérsékleti sugárzására vonatkozó elképzeléseit (a részleteket a következő oldalakon ismertetjük). Ennek a legfontosabb megállapítása az volt, hogy egy n frekvenciájú (rezgésszámú) rezgő atom (ún. "atomi oszcillátor") energiája (szó szerint idézve:) *"meghatározott számú kicsiny egyforma részből áll. Erre a h természeti állandó szolgál, amelyet a rezgésszámmal megszorozva az említett energiaelemet kapjuk."* Ez volt a "kvantumhipotézis" első megfogalmazása.

Rutherford mérései alapján kiderült, hogy egy atom atommagból és a körülötte "keringő" elektronokból áll (1911). Ettől kezdve beszélhetünk "elektronfizikáról" és "atommag fizikáról". A kvantummechanika elsősorban az elektronok viselkedésének a vizsgálata során fejlődött. De a neutron felfedezése (Chadwick 1932) után az elmélet megfelelő általánosítással alkalmas volt az atommag modellek megalkotására is. A kvantummechanikai elmélet és a kísérletezés összhangjának diadala volt az első atomreaktor megépítése (E. Fermi, 1942) és a tranzistor megalkotása (Bardeen, Shockley, Brattain 1947). Egyik sem születhetett volna meg, a kvantummechanika elmélete nélkül. *"Semmi sem olyan gyakorlati, mint egy jó elmélet"* mondotta Boltzmann. A mai mindennapjaink bizonyítják, hogy a kvantummechanika egy jó elmélet!

Tudnunk kell azonban, hogy a kvantummechanika fogalmi rendszere és szemlélete nagyon eltér a megszokott klasszikus fizikai gondolkodásunktól. Ezért a hétköznapi nyelvre "lefordított" állításait a "józan ész" képtelennek és lehetetlennek (abszurdnak) ítéli.

Létezik azonban egy olyan univerzális "formális rendszer" egy egzakt nyelv, amellyel az igen absztrakt állításainkat egyértelműen kifejezhetjük. Ez a "nyelv" a matematika.

Igen komoly filozófiai kérdés az, hogy mi lehet az oka annak, hogy a matematika ilyen jól használható a természetben tapasztalható jelenségek leírásában és megértésében. Tény azonban, hogy szinte egyetlen mód a természeti törvények pontos megfogalmazására az, ha azt a matematikai állítások (egyenletek) formájában adjuk meg. A hétköznapi szemlélet hiánya miatt a Kvantummechanikában erre különösen nagy szükség van. Bár a Fizika nem matematika, de nem lehet meg a Matematika nélkül. Ahogyan azt először G. Galillei megfogalmazta *"A Természet a matematika nyelvét beszéli."* (ekkor a XVII. század elejét mutatta a naptár.)

OROSZ L. Kvantummechanika 4. oldal.

1. KVANTUMMECHANIKA

Bevezető (Történeti áttekintés)

A hőmérsékleti sugárzás jelenségét a hétköznapiakban is mindenki tapasztalhatja. Minden T hőmérsékletű test elektromágneses hullámok formájában energiát sugároz. Ennek oka a testet felépítő atomokban lévő elektromos töltések (gyorsuló, pl. rezgő) mozgása. Abszolút fekete testnek azt a testet nevezzük, amely a ráeső elektromágneses sugárzást teljes egészében elnyeli. Ez a "test" egy tetszőleges anyagi minőségű szilárd anyagba vájt, tetszőleges alakú üreg elegendően kicsiny kivezető nyílásával modellezhető. Ugyanis a nyíláson bejutó fény (elektromágneses sugárzás) elvileg végtelen sok reflexió után érne el ismét a lyuk kivezető nyílását. Ekkorra azonban (az egyes reflexióknál elnyelődött energiák következtében) az intenzitása gyakorlatilag a zérusra csökken. Így a nyíláson belépett fény teljesen elnyelődött. Pontosán ez a fekete test definíciója.

Valamely "T" hőmérséklet esetén az üreg falában az elektromos töltéssel rendelkező atomok (a statisztikus fizikában tanultak szerint) termikus mozgást végeznek. Ezek a "v" frekvenciával rezgő atomok, (ún. atomi oszcillátorok) mint piciny (atomi) antennák elektromágneses hullámot bocsátanak be az üregbe. Ugyanakkor (az üregből) rájuk eső elektromágneses sugárzást el is nyelik. Egyensúly esetén az atomok által elnyelt és kisugárzott energia egymással megegyezik. Mindezek eredőjeként az üregben elektromágneses állóhullámok formájában ρ_v homogén energia sűrűségű elektromágneses tér van jelen. A nyíláson keresztül eltávozó energia evvel arányos kell, hogy legyen. Méréssel megállapítható a kisugárzott E_v energia frekvencia szerinti eloszlása. (Ezt nevezték el "normál spektrumnak". Lásd 3. oldal.) Ez egy jellegzetes, "harang alakú" görbe.

A XIX. század végén a fizikusok sikertelenül próbálkoztak avval, hogy elméleti számításokkal megadják a görbe matematikai alakját. A Maxwell egyenleteket, a termodinamika és a statisztikus fizika ismert törvényeit alkalmazva rendre rossz eredmények születtek (pl. J.W.S. Rayleigh és J.H. Jeans vagy W.Wien). A sikeres megoldás Max Planck (1900) nevéhez fűződik. Elképzelése a következő volt. Termikus egyensúly lévén, a falban lévő tetszőleges v frekvenciájú atomi oszcillátorok átlagenergiája egyenlő kell, hogy legyen az üregben kialakult v frekvenciájú elektromágneses állóhullámok átlagenergiájával. Ebből kifolyólag nyilvánvaló, hogy a rezgő atomok energiája fogja meghatározni az üregben lévő majd onnan távozó (és így a mérhető) elektromágneses sugárzás energiáját. Elméleti számításokkal kimutatta, hogy csak akkor kapható meg a kísérletekben tapasztalható ("harang alakú") emissziós spektrum, ha feltételezzük azt, hogy az atomi oszcillátorok "ε" energiája nem lehet tetszőleges. Pontosabban, egy atomi méretű v frekvenciával rezgő tömegpont (mechanikai oszcillátor) energiája csak a "hv" energia adag ("energiakvantum") egész számú többszöröse lehet, azaz $\epsilon_n = n \cdot h\nu$ ($n=0,1,2,\dots$). Egy oszcillátor energiája tehát "kvantált" azaz nem folytonosan változik. Elvileg ez igaz kell, hogy legyen egy makroszkópikus tömegű rezgő tömeg esetén is. A "h" kicsi értéke miatt azonban a szokásos energiáknál ez a kvantáltság olyan kicsi, hogy a klasszikus mechanikai mérésekkel nem mutatható ki.

A kezdetben pusztán csak egy paraméternek tekintett, "h" értékét úgy kell megadni, hogy az így meghatározott görbe visszaadja a kísérleti eredményeket. A későbbiek során, éppen magának Plancknak az ez irányú erőfeszítései során derült ki az, hogy a "h" (amit előbb "hatáskvantumnak", majd később "Planck állandónak" neveztek el) nem csupán csak egy egyszerű paraméter, hanem egy új természeti állandó. Ugyanis nem fejezhető ki a már ismert klasszikus természeti állandókkal. Maga Planck ezt írta erről visszaemlékezésében: *"Rövidesen próbálkozni kezdtem, hogy a h hatáskvantumot valamiképpen bekényszerítsem a klasszikus elmélet kereteibe, de ez minden ilyen kísérletnek makacsul ellenszegült. Hiábavaló fáradozásaim több éven át elhúzódtak és igen sok munkámba kerültek. Néhány kollegám valami tragikust látott ebben. Nekem más a véleményem. Számomra értékeesebb volt a nyereség, amelyet ez az alapos feltárás hozott. Ma már tudom, hogy a h hatáskvantum a fizikában sokkal jelentősebb szerepet játszik, mint ahogy kezdetben gondoltam. Látom, milyen elkerülhetetlenül szükséges, hogy atomi problémák tárgyalásánál teljesen új szemléletet, teljesen új számítási módszert vezessünk be."*

A "h" (mint a fizika új természeti állandója) mindig megjelenik az elméleti modelljeinkben, ha azok atomi szinten lezajló jelenségeket írnak le.

Az 1918-as fizikai Nobel-díjat Max Planck kapta a „hatáskvantum felfedezéséért”.

Megszületett tehát a Kvantummechanika, amely a XX. század legnagyobb és legsikeresebb szellemi alkotásának bizonyult. Megjelenésével egy teljesen új természetszemlélet és a hétköznapi eszközök soha nem sejtett sokasága jelenik majd meg. Mindezt azonban akkor még senki nem sejtette.

A továbbiakban az adódó matematikai összefüggések egyszerűsítése miatt a \hbar -t (kiejtése: "há vonás") fogjuk használni, amelynek értéke $h/2\pi$. Ez az ún. redukált Planck állandó.

A kvantummechanika kialakulásának fontos állomása volt az ún. "fényelektromos jelenség". Ezt a több mint száz éve ismert effektust hétköznapijainkban is gyakran használjuk, valahányszor egy fotocella vezérelt ajtón átmegyünk.

A XIX. század utolsó harmadában a szikra- illetve gázkisülések vizsgálata (különböző minőségű illetve kis nyomású) gázokban igen érdekes és ugyanakkor egy kísérleti fizikus számára izgalmas kihívást jelentő tudományos kutatás volt. 1888-ban Hallwachs (is) azt tapasztalta, hogy ha a negatív töltésű elektródát ultraibolya fény éri, akkor a szikrakisülés „könnyebben” jön létre. Ebből ő arra a következtetésre jutott, hogy bizonyára az elektródából a fény hatására negatív töltések lépnek ki. Mindez még közel 10 évvel az „elektron” felfedezése előtt történt.

Ma már tudjuk, hogy a fémekben könnyen mozgó elektronok vannak, amelyeket onnan ki is lehet „szabadítani”. A kísérleti tapasztalatok szerint tehát, ha egy fémlapra fény (elektromágneses hullám) esik, akkor a fémből elektronok lépnek ki.

A Maxwell-féle elektrodinamika törvényei szerint, ha a fény kölcsönhatásba lép a pontszerűnek feltételezett elektronnal, akkor a fémből kilépő elektron kinetikus energiája a fény intenzitásával lesz arányos. Mindez könnyen belátható. Az elektromágneses hullámban oszcilláló "E" elektromos térerősség hatására gyorsul fel az elektron. Minél nagyobb ez a térerősség, az elektron annál nagyobb sebességre tesz szert, azaz annál nagyobb mozgási energiával fogja elhagyni a fémét.

A mérések azonban azt mutatták, hogy a távozó elektron kinetikus energiája a beeső fény frekvenciájával arányos. Sőt, ha a fény frekvenciája egy (az illető fémre jellemző) frekvencia értéknél kisebb, akkor nincsen elektronkilépés. Mindezen tények szöges ellentétben álltak a klasszikus fizikai elképzelésekkel.

Az *Annalen der Physik* neves, nívós fizikai folyóirat (volt). A 17. kötete (1905-ös év) különösen érdekes! Ebben a kötetben ugyanis (a 132-ik., az 549-ik és a 851-ik oldalon) három igen fontos cikk jelent meg. Mindegyik a kialakulóban lévő modern fizika egy-egy kulcsfontosságú alapkövét tette le.

Az egyik a „Brown-mozgás elméletét” tárgyalta és így a statisztikus fizika fejlődéséhez járult hozzá.

A második a „mozgó testek elektrodinamikájáról” szólt és a modern tér-idő fogalmunk megszületését jelentette.

A harmadik a fényelektromos jelenség igen ötletes magyarázatát adta, hozzájárulva ezzel a kvantummechanika kialakulásához ugyanakkor már a „kvantumelektrodinamika” csíráját is magába rejtette.

Már az sem mindennapi (még egy ily' neves tudományos folyóirat életében sem), hogy egyetlen kötetében (alig több mint 700 oldalon belül) ennyi zseniális és újszerű gondolat jelenjen meg. De sokkal meglepőbb a helyzet, ha figyelembe vesszük, hogy mindhárom cikk fejlécén ugyanaz az (addig gyakorlatilag ismeretlen) név szerepelt. A név viselője egy akkor 26 éves fiatalember, a berni szabadalmi hivatal kezdő alkalmazottja volt. Neve ma már szinte a „legismertebb tudós név” még a közember számára is.

Ő volt Albert Einstein!

A fényelektromos jelenség magyarázatát tehát A.Einstein adta meg (1905). Feltételezte, hogy a V frekvenciájú fény az elektronnal való kölcsönhatás során az elektronnak csak " $h\nu$ " nagyságú energiát adhat át. Ezt az energia adagot ("fénykvantumot") fotonnak nevezte el. Ha ez az energia kisebb, mint az elektront a fémfelülethez kötő maximális energia (ezt a Φ_0 "kilépési munkának" nevezik.) akkor az elektron nem tud kilépni a fémből.

Alkalmazva a relativisztikus mechanika összefüggéseit Einstein a fotonhoz egy impulzust is rendelt. Így a fotont egy részecske tulajdonságaival ruházta fel (aminek a nyugalmi tömege zérus). Megszületett a híres (és azóta is gyakran félreértett) "hullám- részecske kettős természet" ideája. A "foton" fogalma nem egyszerű. A hétköznapi értelemben vett szemléletes képet igen nehéz alkotni róla. Kezdetben Einstein véges hosszúságú igen keskeny hullámvonulatnak képzelte. Ezt szemléletesen a fény "tűsugárzás" elméletének nevezték. Azonban 1911-ben a magyar Selényi Pál elsőként kísérletileg bebizonyította, hogy az atomi fénykibocsátás gömbhullám formájában történik. Ezt a "hullám képet" igen nehéz összeegyeztetni a foton "részecske" képével. Nem véletlenül mondta Debye: "A fizikusok nagy szerencséje, hogy Selényi a kísérletét nem néhány évvel korábban végezte el. Akkor talán meg sem születhetett volna a fénykvantumok elmélete." A T. Huxley jósolta "mészárlás" (3.oldal) ezúttal elmaradt. A foton furcsa fogalmának a fogadtatására Planck mondatai is jellemzőek, eszerint: "Einstein nagyságából mit sem von le az a körülmény, hogy más tanulmányaiban kalandos és megalapozatlan hipotézisekbe bocsátkozik. Egyik ilyen hipotézise fénykvantumok létezésének a feltételezése ". Ekkor 1914-et írtak.

Az 1921-es fizikai Nobel-díjat Albert Einstein kapta: "érdemdús matematikai-fizikai kutatásaiért, különös tekintettel a fényelektromos -jelenség törvényének a felfedezésére "

A fotonimpulzus (mint részecske tulajdonság) közvetlen bizonyítékát A.H.Compton mérései szolgáltatták 1923-ban. A róla elnevezett „Compton-effektus” felfedezéséért 1927-ben Nobel díjat kapott.

Ettől kezdve a "foton" fogalma végleg meggyökeresedett a fizikában. A kvantummechanika majd a (relativisztikus-)kvantumelektrodinamika fejlődésével egyre bonyolultabbá vált de mára már a mindennapi fizikai gondolkodásunk szerves része.

„A közvélemény Einsteinról alkotott képét nagyrészt közepes tehetségű emberek alakították ki. Az újságírók örökké interjúért zaklatták, könyveket írtak életéről és eredményeiről, úgy tettek, mintha megértenék azokat a problémákat, amelyekkel birkózott. Az így létrejött közvéleménykép messze állott a valóságtól. Elég nehéz dolog egy olyan génuszt értékelni, aki ilyen egyedülálló adottságokkal rendelkezik és ilyen egyedüli helyet foglal el a tudománytörténetben....” Írta róla a magyar származású Lánczos Kornél, aki hosszú éveken át Einstein közvetlen munkatársa és így személyes jó ismerőse volt. Nyilván való, hogy a „Térről” és az „Időről” mint alapvető fogalomról mindnyájunknak van valamilyen (a hétköznapi tapasztalatán alapuló) elképzelése. Annyira megszoktuk már ezeket a fogalmakat, amelyek a maguk módján beépültek a szemléletünkbe, hogy minden ettől eltérő állítás mélyen mehökkent minket. Nem meglepő tehát, hogy az einsteini Térdő fogalom forradalmian új struktúrája és a hozzá kapcsolódó speciális relativitáselmélet volt az, amely Einsteint közismertté tette. Pedig a valóban eredeti alkotása a „foton” fogalma volt!

A „különc, tudós professzor sztereotípiája” Einsteinben látszott testet ölteni. Sok személyéhez kötődő „story” él és terjed róla, amelyeknek nagy részét éppoly mehökkentő „legendává” alakította a szájhagyomány, mint amilyen elméletének furcsasága volt. Ezek egy része nélkülözi a valóságos alapokat, de ahogyan mondani szokás „ha nem is igaz, jól ki van találva”!

„Nem volt csodagyerek, bár a természet titkai már igen hamar érdekelni kezdték. Az ötéves korában ajándékba kapott iránytű rendkívüli módon lenyűgözte és erősen hatott rá az az elemi geometriai kézikönyv, ami tizenkét éves korában került a kezébe. Az iskolák nemigen feleltek meg Einstein vérmérsékletének, és tanárai gyakran fegyelmezetlennek találták. Egyik elkeseredett tanára egyszer meg is jósolta nem túl találóan: >>Einstein, Einstein, maga semmire sem fogja vinni az életben!<<”- írta Lánczos Kornél.

Később, egyetemi éveit alatt sem tűnt ki a társai közül. „Egyik matematikaprofesszora az a Hermann Minkowski volt, aki később a speciális relativitáselmélet geometriai értelmezésének úttörője lett. Amikor elolvasta Einstein 1905-ös tanulmányát, igen meg volt lepve. >>Ez ugyanaz az Einstein lenne –kérdezte egyik barátjától - , aki néhány éve a diákom volt? Akkor úgy látszott, hogy nagyon keveset tud!<<” (L.K.)

A társadalmi átlagra tervezett intézményes oktatás és a különlegesen gondolkodó Einstein konfliktusa szükségképpen végig kísérte az életét. Nem volt „jó” diák és egyetemi tanársága idején nem szeretett tanítani sem. Bár mindez igen izgalmas lehet az utca emberének, de a „zseniális bukott diák” legendája csak a középszerűség önámításának tekinthető.

Mint már az előzőekben említettük a gázkísülések és ezen belül az ún. a katódsugárzás vizsgálata a XIX. század végén érdekes tudományos munka volt. Lassan kialakult a sejtés, hogy talán a katódsugarakban addig ismeretlen, elektromos töltéssel rendelkező részecskék áramlanak. J.Stoney 1890-ben ezeknek a (hipotetikus) részecskéknak az „elektron” nevet adta.

1897-ben J.J.Thomson a katódsugarak elhajlást vizsgálta elektromos térben. Sikertelenül bebizonyította, hogy a katódsugárzás valóban negatív töltések (tehát elektronok) áramlásából áll. Meghatározta a katódsugarban repülő elektronok tömeg-töltés arányát. A kísérlet részleteiből azt a következtetést vonta le, hogy az elektronnak univerzális és elemi részecskének kell lennie. Az elektron léte fizikai realitássá vált.

Valószínűleg még senki nem sejtette azt, hogy a felfedezett elektron, a XX. század alapvető objektuma lesz és egész iparágak épülnek majd rá. 1906-ban a fizikai Nobel-díj nyertese az első elemi részecske felfedezője J.J.Thomson volt.

J.J. Thomson joggal feltételezhette, hogy a katódsugárcsőben mozgó elektronok csakis az elektróda anyagát felépítő atomokból származhatnak. Így az addig „oszthatatlannak” (ez az „atom” szó eredeti jelentése) gondolt atom valójában egy, elemibb részletekkel bíró objektum, azaz valamilyen szerkezete van. A XIX-XX. század fordulójára (az addigi tapasztalatok alapján) megszületett az ún. Thomson-féle atommodell. Eszerint az atom egy kb. 10^{-10} m átmérőjű gömb alakú egyenletes pozitív töltéseloszlás, amelyben pontszerű elektronok úszkálnak.

Ernest Rutherford angol fizikus közvetlen mérésekkel szeretne volna ellenőrizni a modell helyes voltát. Ezért elektronjuktól megfosztott He (hélium) atomokat lőtt vékony fémfóliára. A visszapattanó és a fólián szinte akadálytalanul áthatoló He lövedékek aránya azt mutatta, hogy a Thomson-féle atommodell nem helyes (1907, 1911). A szórás kísérletek eredménye szerint, az atomban a pozitív töltés csak egy „kicsiny” térrészbe, egy kb. 10^{-15} m átmérőjű gömbbe koncentrálódik. Ezen kísérleti tény alapján Rutherford egy új atommodellt alkotott. Eszerint az atom egy kb. 10^{-15} m átmérőjű pozitív töltésű atommagból és körülötte mozgó elektronokból áll. A továbbra is pontszerűnek képzelt elektronok, a Coulomb vonzás következtében, az atommag körül keringenek egy kb. 10^{-10} m sugarú pályán. A hidrogén atom a periódusos rendszer első eleme. Ha megfosztjuk az egyetlen

elektronjától, akkor egy még elemibb objektumot kapunk, amelyik így az "első előtt álló" (görögül protosz) lesz. Rutherford a hidrogén atom magját "protonnak" nevezte el.

Rutherford atommodellje a kvantummechanika fejlődésének egyik gerjesztője volt, és mint ilyen fizika-történeti jelentősége óriási. Megalkotója a kémiai Nobel-díjat (nem ezért, hanem még korábban) 1908-ban, a rádióaktivitással kapcsolatos kutatásaiért kapta (többek között az „alfa” és a „béta” sugárzás azonosítása és elnevezése is tőle származik).

OROSZ L. Kvantummechanika 6. oldal

A Rutherford féle atommodell megfelelt ugyan a korabeli kísérleti tényeknek, de alapvető elméleti hiányossága is volt. Ugyanis, ha az elektron kering az atommag körül, akkor centripetális gyorsulással rendelkezik. Ekkor azonban, az elektrodinamika törvényei szerint, elektromágneses hullámot kellene gerjesztenie és így energiát kellene állandóan kisugározni. Az elektron (az energia-megmaradás elve értelmében) állandóan veszítené az energiájából és rövid idő alatt beleesne az atommagba (elméleti becslések szerint ez kb. 10^{-18} sec). Azaz az atom nem lenne stabil. Ugyanakkor igaz viszont az is, hogy a spektroszkópiai megfigyelések szerint az atomok bizonyos körülmények között elektromágneses hullámot bocsátanak ki. A kisugárzott energia frekvencia szerinti eloszlása minden fajta atomra (sőt molekulára) különböző. Közös jellegzetességük a diszkrét frekvencia eloszlás. Ezt "vonalas spektrumnak" hívjuk.

A legegyszerűbb atom a hidrogén atom. Ezért célszerű, ha először a hidrogén atom spektrumát próbáljuk megérteni. Kezdetben csak a négy látható vonal (frekvencia illetve hullámhossz érték) volt ismeretes.

Az 1860-as évektől a spektroszkópia megfigyelések során hatalmas mennyiségű kísérleti adat gyűlt össze. A hidrogén atom látható négy spektrumvonalát igen nagy pontossággal Anders Angström mérte meg. A kísérleti spektroszkópia fejlődése lehetővé tette, hogy a megfigyeléseket kiterjesszék mind az infravörös, mind pedig az ultraibolya tartományba is. Így „láthatóvá vált” a hidrogén atom többi (rendkívül sok) spektrumvonala is.

Az IQ tesztek egyik közkedvelt feladata, amikor szabályosságot kell felfedezni egy adott számsor elemei között. Például az (1,2,3,5,8,...) feladatot az emberek döntő többsége könnyedén megoldja. Valamivel nehezebb lenne a következő (1, 7/2, 7, 23/2, ...). Érdekes feladatnak mutatkozik a (1, 9/8, 5/4, 4/3, 3/2, ...) számsor is. Erre csak akkor tudunk könnyen válaszolni, ha „segítségként” felírjuk: (c, d, e, f, g, a, ...). Szinte rögtön felismerjük, a C-dur hangsor alaphanghoz viszonyított frekvenciáit.

Mindezen előkészítés azt a célt szolgálta, hogy kellően felmérjük annak a feladatnak a nehézségét, amelyben szabályosságot kell felfedezni a (6562.1, 4860.74, 4340.10, 4101.20, ...) szám adatok között. Az első ránézésre a megoldás meglehetősen komplikáltnak ígérkezik. Hacsak nem találunk valamiféle vezérfonalat, (hasonlóan a C-dur skálához) a megoldás szinte reménytelennek tűnik. Pedig ezt a feladatot már megoldotta valaki. Az illető Johann Jacob Balmer svájci középiskolai tanár volt. A meglepően egyszerű megoldás a bázeli leányiskola évkönyvében látott először napvilágot, majd 1885-ben egy rövid közlemény formájában az „*Annalen der Physik*”-ben, a kor vezető európai tudományos folyóiratában is megjelent. A közlemény címe: „Megjegyzések a hidrogén atom színképvonalaihoz”. A megadott számsor ugyanis a hidrogén atom által kibocsátott látható fény hullámhosszait jelenti 10^{-10} m egységben.

J.J.Balmer ábrázoló geometriát tanított. A geometria nemcsak önmagában érdekelte, de foglalkoztatta annak építészeti és művészeti vonatkozása is. Szerteágazó érdeklődési köre tette őt alkalmassá arra, hogy igen egyszerű formulát kapjon a hidrogén atom fent megadott spektrumvonalainak a megadására. A fizikátörténet bizonyítja, hogy egy új tudományterület kezdeti szakaszában elsősorban a széleskörű ismerteken alapuló analógiaérzék lehet igen gyümölcsöző, természetesen csak akkor, ha mindez logikai igényességgel is társul. Ez történt Balmer esetében is. Filozófiai beállítottságát tekintve „Pithagoras” követői közé tartozott, aki hitt abban, hogy a világ jelenségei összefüggő harmóniát alkotnak és ez a harmónia egész számokkal kifejezhető. Feltételezte ezért, hogy hasonlóan a C-dur skálához a hidrogén atom spektruma is egész számokkal megadható. Maga a módszer, ahogyan Balmer a végső felismeréshez eljutott igen eredeti és intuitív, de most nem fontos. A lényeg az, hogy végülis a hidrogén atom látható frekvencia spektrumára a következő összefüggést kapta:

$$\nu = R \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 3, 4, 5, 6), \text{ ebből a keresett hullámhosszak a } \lambda = \frac{c}{\nu} \text{ hányados segítségével}$$

megkaphatók.

Balmer formulája és neve csaknem 20 évre feledésbe merült. Csak akkor fedezték fel újra, amikor Rydberg (1890) és Ritz (1906) munkássága következtében nyilvánvalóvá vált az, hogy kellő általánosítással, a

képlet segítségével az összes (ultraibolya és infravörös tartományban lévő „végtelen sok”) frekvenciaérték is kiszámítható.

A Balmer-formula megadta ugyan a hidrogén atom teljes sugárzási spektrumát, de azt megmagyarázni nem tudta.

Végül is Niels Bohr dán fizikus volt az, aki három egyszerű posztulátum (alapfeltevés) segítségével matematikai levezetést adta a Balmer formulának (Koppenhága, 1913. április). A Bohr-féle modell alapfeltevései a következők.

- 1.) Az elektron a hidrogén atomban csak meghatározott energiájú pályákon tud sugárzás nélkül keringeni. Ezek a (kör)pályák tehát stabilak.
- 2.) Ha az elektron egy magasabb energiájú pályáról egy alacsonyabb energiájú pályára "ugrik", akkor az energia különbséget egy $h\nu$ energiájú foton kibocsátásával leadja.
- 3.) Csak azok a (kör)pályák stabilak, amelyen az elektron pályamozgásból adódó perdülete, a „ \hbar ”-nak egész számú többszöröse.

A körpályán történő mozgáshoz szükséges centripetális gyorsulást az elektron és a proton között fellépő Coulomb erő biztosítja. A 3. posztulátumban rögzített kvantálási törvény segítségével a diszkrét energiaszintek kiadódnak. A 2. posztulátum alapján pedig a Balmer formula egyszerűen megkapható.

Később megszületett a modell egy továbbfejlesztett változata is, amelyben az elektron (az általánosabbnak tekinthető) ellipszis pályákon is mozoghat. Ez volt a Bohr- Sommerfeld modell.

N.Bohr a fizikai Nobel-díjat 1922-ben kapta meg, az indoklás szerint: „Az atomok szerkezetének és az azokból eredő sugárzásoknak a vizsgálataiért.” Modelljének merész újdonsága döntő lépés volt abba az irányba, amely szakítást jelentett a megszokott klasszikus fogalmakkal. Bohr ennek tudatában volt, szavait idézve: „...az előadott gondolatok merev ellentétben állnak a fogalmaknak azon csodálatra méltó, összefüggő rendszerével, melyet joggal >>klasszikus<< elektrodinamikának nevezünk”

A fizikusok feltételezték, hogy minden atom szerkezete a hidrogén atoméhoz hasonló.

A diszkrét energiaszintek közvetlen mérését J.Franck és G.L.Hertz valósította meg (1913-ban, hat hónappal a Bohr modell megszületése után!). A mérés elve az volt, hogy megmérték a higany atomokkal ütköző elektronok ütközés utáni kinetikus energiáját. A higany atom tömege kb. nyolcvanezerszer nagyobb, mint az elektron tömege és a kísérletben az átlagsebessége az elektronokéhoz képest elhanyagolható. Ha az ütközés során az ütköző elektron kinetikus energiája lecsökken (azaz az ütközés rugalmatlan), akkor ez azt jelenti, hogy a higany atom valamelyik elektronjának az energiája megnövekedett. Ha az atomban az energiaszintek diszkréték, akkor az ütköző elektronok energiacsökkenése nem lehet akármekkora.

1926-ban a fizikai Nobel-díjat megosztva J.Franck és G.L.Hertz kapta „az elektronok és az atomok egymás közötti ütközés törvényeinek a felfedezésért”.

OROSZ L. Kvantummechanika 7. oldal.

A lineáris oszcillátorra vonatkozó Planck-féle és a körmozgásra vonatkozó Bohr-féle kvantálási törvény formailag nagyon különbözik egymástól. Mi lehet az az általános kvantálási törvény, amely minden esetben érvényes? A választ Bohr és Sommerfeld adta meg 1916-ban. Az általánosítás alapja az, hogy egy tetszőleges, (egydimenziós) periodikus mozgást végző tömegpont mozgását az impulzus és a koordináta által definiált ún. fázissíkban egyetlen fázispontnak zárt trajektorián történő mozgásával adhatjuk meg. A kvantálási törvény az, hogy ezen zárt görbe által határolt terület a „ h ” Planck állandó egész számú többszöröse lehet csak. A törvény általánosítható tetszőleges szabadságfokú mozgás esetére is. Ekkor az összetartozó (általános) koordináta és (általános) impulzus párokra kell alkalmazni az említett összefüggést.

OROSZ L. Kvantummechanika 8. oldal.

Louis de-Broglie 1923-ban (majd az 1924-ben megvédett doktori dolgozatában) egy igen furcsa hipotézist dolgozott ki. Arra gondolt, hogy ha az elektromágneses tér hullámszerű tulajdonságot (pl. diffrakció, interferencia, stb...) és részecske jellegű tulajdonságot (foton!) is mutat, akkor ez a "kettősség,, esetleg az elektronokra is igaz. Azaz az elektron mozgásához egy valamiféle hullám rendelhető.

Később így emlékezett vissza azokra az időkre:

„...nem könnyű szívvel, hanem vonakodva és kényszer hatására hagytam el a klasszikus fizika hagyományos pozícióit, ez a megállapítás talán megmutatja a hitetlenkedőknek, hogy a hagyományos pozíciók mennyire védhetetlenné váltak.”

„... aki egy új elmélet alapvető gondolatait kifejti nem mindig veszi észre rögtön annak minden következményét. Személyes meglátásai alapján irányítva, a matematikai hasonlóságok belső ereje által indítva, szinte önmaga ellenére kényszerül új útra, amelyről maga sem tudja, hogy tulajdonképpen hova vezet...” „Lassanként olyan értelmezésekre kényszerül, amelyekre eredetileg nem is gondolt...”

„Minthogy a fényelmélet keretében össze kellett házasítani a megfelelően értelmezett hullám- és részecske-fogalmat, szükségszerűen felmerült a következő kérdés: Vajon az elektronnak, akárcsak a fénynek, a jól ismert korpuszkuláris természetén kívül nincsen-e hullám természete is, amely a hullámoptikához hasonló jelenségekben nyilvánul meg?” 1923-ban „ennek a kérdésnek a felvetése igen merész dolog volt, mert akkor még semmi sem mutatott arra, hogy az elektronnak hullámtermészete is van. De ha az ember elgondolkozott a kvantumelmélet által bevezetett új fogalmakon, akkor lehetett találni néhány bizonyítékot, amely az elgondolás helyessége mellett szólt.” Például: „...Planck, Bohr és Sommerfeld által bevezetett kvantumfeltételekben egész számok szerepelnek, ami az anyagi pont dinamikájában még sohasem fordult elő, de egészen megszokott olyan problémákban, amelyekben hullámokról van szó (interferencia, rezonancia, stb...)”

L. de-Broglie ezt a hullámot igen találóan "vezérhullám"-nak nevezte el és meglehetősen óvatossággal fogalmazott:
„Az anyagi részecskék lehetséges megnyilvánulásainak térbeli eloszlását ekkor a részecskékhez társuló hullám terjedése kell, hogy leírja...”

A mindennapokban a fizikusok ezt a vezérhullámot „elektronhullámnak” szokták hívni. Ez azonban azt a hamis képet sugallja, mintha „az elektron maga hullámzana”. Mint az majd később ki fog derülni, ez nincsen így. Mindenesetre a félreértések elkerülése végett mi az elkövetkezőkben a „de-Broglie hullám” elnevezést fogjuk használni.

De Broglie feltevése szerint, az általa bevezetett hullám frekvenciája és hullámhossza az elektron energiájából és impulzusából számítható ki ($E = \hbar\omega$, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$), hasonló módon, mint ahogyan azt a foton esetében láttuk.

Ennek az igen furcsa hullám-modellnek a meglepő eredménye az volt, hogy segítségével a Bohr féle harmadik (kvantálási) hipotézis igen szemléletes jelentést kapott. Nevezetesen csak azok a pályák stabilak, amelyeken az elektronhoz rendelt "vezérhullám" önmagával interferálva állóhullámot alakít ki.

Az 1929-ben kiosztott fizikai Nobel-díj tulajdonosa Louis de Broglie lett „az elektron hullámtermészetének a felfedezéséért”.

Az elektron hullámtulajdonságának a közvetlen kimutatása C.J.Davisson és munkatársa L.H.Germer (1927) amerikai fizikusok nevéhez fűződik. Nikkel kristály felületéről szóródó elektronnyaláb intenzitás-eloszlását vizsgálták. Ez olyan volt, hogy az csak az elektronokhoz rendelt de-Broglie féle hullámoknak a kristályatomokon történő diffrakciójával volt magyarázható. Hasonlóan a röntgen sugárzás Bragg-féle reflexiójához. Ez azt jelenti, hogy egy kristály röntgendiffrakciós és elektrondiffrakciós képe meglehetősen hasonló. Tőlük függetlenül G.P.Thomson (Aberdeen, 1928) arany, platina és alumínium filmekben áthaladó elektronnyaláb diffrakciós képeit hozta létre.

Mivel ezek a kísérletek alapvetően hozzájárultak a kvantummechanikai gondolkodásmód fejlődéséhez így az 1937-es fizikai Nobel-díjat megosztva C.J.Davisson és G.P.Thomson kapta.

Tudománytörténeti érdekesség, hogy G.P.Thomson aki az „elektron hullám” kísérleti kimutatásáért nyerte el a legnagyobb tudományos díjat, annak a J.J.Thomsonnak a fia, aki 31 évvel előtte az „elektron mint elemi részecske” kimutatásáért kapta meg ugyanezt a tudományos elismerést.

Joggal merül fel a kérdés: valójában mi is az, ami „hullámsz?”!

Erre a nyilvánvaló kérdésre azonban még nem volt válasz! De Broglie szavait idézve:

„A hullám-részecske dualitás helyes értelmezését azonban nem láttam világosan és továbbra is foglalkoztatott a kérdés.” Tegyük hozzá: ebbéli gondolataiban nem volt egyedül!

A 24 éves(!) Werner Heisenberget (aki ekkor Göttingenben magántanárként dolgozott) nagyon zavarta az, hogy a Bohr-féle atommodell túl szemléletes. Olyan sajátosságokat tulajdonít az elektronnak, amit közvetlenül még soha senki nem mért meg (pl.:a pontszerű elektron az atomban kering). Ezért kigondolt egy olyan számítási módszert, amely kiindulásul csak a hidrogén atom megmérhető adatait tartalmazta (a Balmer-féle frekvenciákat) Ezeket az adatokat táblázatokba rendezte és a táblázatokkal fura, általa definiált műveleteket kellett végezni. Mint utóbb kiderült ezek mátrix műveletek voltak. Megszületett az ún. "mátrixmechanika" (1925), egy eredeti módszer, amit senki sem értett meg igazán!

Amúgy W.Heisenberg a XX.századi fizika egyik nagy egyénisége. A Kvantummechanika egyik kidolgozója aki a szilárdtestfizikában (ferromágnesség elmélete) és az atommagfizikában (atommagmodellek) is sokat és maradandót alkotott. Később még találkozunk a nevével! A fizikai Nobel-díjat 1933-ban kapta meg.

OROSZ L. Kvantummechanika 9. oldal.

1.1. Hullámmechanika

1.1.1 A Schrödinger egyenlet és a hullámfüggvény

Az anekdota szerint a kvantummechanika axiomatikus kiépítésének a története a Zürichi Egyetem egyik elméleti fizika szemináriumán elhangzott, ártatlannak tűnő kérdéssel vette kezdetét. Ebben az időben (1925, 26) Peter Debye a zürichi Műszaki Főiskola tanára volt. Rendszeresen szervezett közös szemináriumokat az Egyetem fizikusaival. Ő javasolta (az ott elméleti fizikát tanító, akkor 39 éves) Ervin Schrödingernek, hogy egy ilyen közös szeminárium keretében ismertesse Louis de Broglie (1924) doktori dolgozatát. Az a feltételezés, hogy az elektron valamiféle "hullám jellegű tulajdonságokkal" is rendelkezik nem kis meglepetést okozott a kor fizikusainak. A fiatalság (mint mindig) most is nagy érdeklődéssel fordult az új és igencsak "furcsa" elmélet felé. Az ominózus szeminárium végén Pete Debye feltette a kérdést az előadónak:

"Ha van hullám, akkor hullámegyenletnek is lennie kell! Milyen ez az egyenlet?"

Természetesen az azonnali válasz elmaradt, hiszen de Broglie publikált dolgozatában erről nem esett szó. Schrödingert azonban elgondolkoltatta a feltett kérdés és maga próbált válaszolni rá. Pár hét múlva megszületett az ún: "Schrödinger egyenlet", amely a (nemrelativisztikus) kvantummechanika egyik axiómája lett (A mi besorolásunk szerint ez az 5.axióma).

Az *Annalen der Physik* (1926 január, február, május és júniusi számában) összesen négy cikk jelent meg (gyors egymásutánjában) amely a témával foglalkozott. Schrödinger először egy relativisztikus egyenletet (a későbbi ún. Klein–Gordon egyenletet) konstruálta meg, de ez nem adta meg jól a "próbakőnek" tekintett Hidrogén atom spektrumát. Végül is ennek egy nemrelativisztikus közelítése vezetett a helyes eredményre.

A későbbiekben ezt az egyenletet nevezték el Schrödinger egyenletnek és megalkotóját az 1933. évi fizikai Nobel-díjjal tüntették ki.

Mivel a Schrödinger egyenlet a kvantummechanika egyik alapfeltevésének (azaz axiómájának) bizonyult, így az nem vezethető le más ismert törvényeinkből! Intuitív lépések nyomán kimondott hipotézisről (feltételezésről) van szó, amelyet majd a gyakorlat "bizonyít" vagy cáfol. Túl hosszú lenne, hogy tudománytörténeti hitelességgel kövessük az egyenlet megszületésének minden részletét. Erre nincs is szükség, mert ma már számtalan visszaemlékezés és önéletrajzi írás jelent meg, amely a "fizika újkori" forradalmával, a modern fizika megszületésével foglalkozik.

Mi egy olyan gondoltmenetet mutatunk be, amely lényegét tekintve hasonló ahhoz, mint amit Schrödinger követhetett. Az előtanulmányaink hiányos volta miatt azonban ez sokkal egyszerűbb, mint az eredeti volt (lehetett).

Tudjuk, hogy egy szabadon mozgó tömegponthoz (a továbbiakban legtöbbször elektront fogunk mondani) egy síkhullám rendelhető a de-Broglie által definiált módon.

A szabadon mozgó, tömegpontnak képzelt elektron energiája és impulzusa közötti kapcsolatot a newtoni mechanika határozza meg (energia megmaradás tétele). Ez az összefüggés egyértelműen megadja az elektronnak rendelt síkhullám frekvenciája és hullámszáma közötti kapcsolatot is (ennek neve diszperziós összefüggés).

Első lépésként tehát egy olyan differenciálegyenletet kell keresni, amelynek a megoldása olyan síkhullám, amely kielégíti a diszperziós összefüggést. Ez egyszerűen hely és idő szerinti deriválásokkal megkapható.

Az így kapott másodrendű (négyváltozós) parciális differenciálegyenlet még csak a szabadon mozgó elektronhoz rendelt sikkhullámot adja meg.

Axióma rangjára akkor emelkedett ez az egyenlet, amikor Schrödinger feltételezte azt, hogy ugyanez az egyenlet érvényes tetszőleges mozgás esetén is. Ekkor a potenciális energia a hely és az idő tetszőleges függvénye lehet. Az egyenlet megoldása pedig komplex alakban felírható helytől és időtől függő valamilyen $\Psi(\vec{r}, t)$ függvény lesz. Ennek neve: "állapotfüggvény" vagy "hullámfüggvény". Megszületett az ún. „időfüggő Schrödinger egyenlet”, egy egyenlet, amit minden fizikus rögtön használni tudott.

De a kérdés továbbra is válasz nélkül maradt: "Mi az, ami hullámszik?"!

Az időfüggő Schrödinger egyenlet formálisan igen egyszerű alakba írható fel, ha bevezetjük az ún. "operátorok" fogalmát. Operátoroknak nevezzük jól definiált matematikai műveletek együttesét. Ha egy operátor egy függvényre hat, akkor ez azt jelenti, hogy a függvényen végre kell hajtani azokat a műveleteket, amelyeket az illető operátor előír. Az operátor tehát egy függvényt egy másik függvénybe transzformál (egy függvényhez egy másik függvényt rendel.)

Az időfüggetlen Schrödinger egyenletben szereplő operátort Hamilton operátornak nevezik.

A parciális differenciálegyenletek megoldása általában igen bonyolult matematikai feladat.

Csökkennek a nehézségek, ha a többváltozós differenciálegyenlet egyváltozós ún. "közönséges" differenciálegyenletké alakítható át. Ezt a műveletet szeparálásnak (a változók szétválasztásának nevezzük.). A keresett többváltozós függvény ekkor egyváltozós függvények szorzataként írható fel.

Ha az elektron potenciális energiája nem függ az időtől, akkor az elektron összenergiája állandó, azaz konzervatív rendszerről van szó. Ebben az esetben (tetszőleges helyfüggő potenciális energia esetén is) a megoldás felírható egy (csak a helykoordinátáktól függő) háromváltozós és egy (csak az időtől függő) egyváltozós függvény szorzataként. Azaz a helykoordináták és az időparaméter szeparálhatók.

A szeparálás műveletét a későbbiekben sokat fogjuk használni. Főbb lépései a következők:

1. A megoldásfüggvényt a feltételezett szeparált alakba írjuk.
2. Végrehajtjuk a differenciálegyenletben előírt deriválási műveleteket.
3. A differenciálegyenlet mindkét oldalát elosztjuk a szeparált alakban felírt megoldásfüggvénnyel
4. Az egyenletet úgy rendezzük, hogy az egyenlet egyik oldalán csak az egyik változótól függő kifejezések szerepeljenek.
5. Ezután mind a két oldalt ugyanazzal az állandóval tesszük egyenlővé.

A közölt módszerrel az időfüggő Schrödinger egyenlet szeparálható. Az időfüggő függvényre vonatkozó közönséges differenciálegyenlet egyszerűen megoldható. A helyfüggő függvényre az ún. időfüggetlen Schrödinger egyenlet adódik. Ezt megoldani csak a potenciális energia ismeretében lehet. A szeparálás során bevezetett „E” ún. szeparálási állandó fizikai jelentését egy újabb axióma (a 3. axióma) alapján tudjuk majd megmondani. Fogadjuk most el mintegy kijelentésként, hogy az E a rendszer összenergiáját adja.

Hátra van még annak a kiderítése, hogy mi a hullámfüggvény fizikai jelentése, azaz "Mi az, ami hullámszik!?"

Fizikai jelentése csak valós mennyiségnek lehet. Mivel a $\Psi(\vec{r}, t)$ állapotfüggvény komplex, ezért valami módon egy $P(\vec{r}, t)$ valós függvényt kell hozzárendelni. Mint minden fizikai tartalommal rendelkező \vec{r} helyvektortól függő térfüggvénynek, így ennek a függvénynek is ki kell elégítenie néhány általános feltételt. Ezek alapvető fizikai megfontolásokból adódnak. Ezek szerint tehát $P(\vec{r}, t)$ függvénynek egyértékűnek, folytonosnak és végesnek kell lennie. Belátható, hogy a $\Psi(\vec{r}, t)$ állapotfüggvény is ugyanezen tulajdonságokkal kell, hogy rendelkezzen. Ezeket a tulajdonságokat (feltételeket) regularitási feltételeknek (regula = szabály) nevezzük. A későbbiekben mindig így fogunk rá hivatkozni. Mint az majd kiderül erre mindig sor kerül, valahányszor megoldjuk a Schrödinger egyenletet. A fontossága miatt célszerű ismét összefoglalni:

- A $\Psi(\vec{r}, t)$ függvény reguláris, ha:
1. egyértékű,
 2. folytonos,
 3. véges (ez utóbbit később még kiegészítjük).

Már csak az a kérdés, hogy mi módon kell a komplex állapotfüggvény ismeretében a valós $P(\vec{r}, t)$ függvényt megadni és mi lesz ennek a fizikai jelentése?

OROSZ L. Kvantummechanika 12. oldal.

Először maga Schrödinger is arra gondolt, hogy létezik valamiféle "anyagi közeg", (az elektron anyaga), amelyben a létrejövő és tovahaladó jól lokalizált gerjesztést, mint egy elektront érzékeljük. Azonban ez az amúgy tetszetősnek tűnő elképzelés tarthatatlannak bizonyult. Ennek oka a következő:

Mint azt a bevezetésben láttuk minden lokalizált gerjesztés hullámcsomagként is felfogható, azaz elemi síkhullámok szuperpozíciójaként előállítható. Általános esetben ezen elemi síkhullámok fázissebessége függ a síkhullám frekvenciájától, így a kezdetben jól lokalizált hullámcsomag "szétfolyik". Az általunk végzett számításokban ez azért nem jelent meg, mert egy igen keskeny spektrumot vizsgáltunk, amelyen belül (közelítésként) minden összetevő elemi síkhullám fázissebességét ugyanakkorának vettük azaz az „ $\omega(k)$ ”-t linearizáltuk

Elektron esetén a hullámcsomag szélessége (azaz az elektron „mérete”) kb. 10^{-17} secundum alatt megduplázódik. Azaz, ha a Schrödinger-féle elképzelés „igaz” volna, akkor az elektron nem lenne stabil részecske.

OROSZ L. Kvantummechanika 13. oldal.

Végül is a hullámfüggvény fizikai értelmezésére vonatkozó, mindent kielégítő megoldást Max Born találta meg (1926). Javaslatja rendkívül szokatlan, a klasszikus fizikai szemléletünkkel és ismeretelméleti elképzelésünkkel nehezen összeegyeztethető volt. Nem véletlen, hogy a kvantummechanika „nagy öregjei” közül jó néhányan nem tudták elfogadni és azóta is sok fejtörést okoz számunkra. Mára már a sok kísérleti tapasztalat egyértelműen igazolta a borni hipotézis helyességét és ennek következtében beépült a fizikusi paradigmarendszerünkbe. Mindez megváltoztatta a világ megismerhetőségére vonatkozó fizikai elképzeléseinket. Ugyanakkor sokszor filozófiai félremagyarázások és hamis következtetések kiindulópontjává is vált.

Legyen a $P(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$ az állapotfüggvény abszolút értékének a négyzete!

$P(\vec{r}, t)dV$ annak a valószínűségét adja, hogy a pontszerű elektron az \vec{r} helyvektor dV környezetében van (azaz ott megtalálható).

Tekintsük most ezt az intuitív kijelentést egy axióma jellegű állításnak, azaz minden különösebb indoklás nélkül fogadjuk el! Kísérleti eredmények sokasága válik ezzel értelmezhetővé, amely igazolja majd feltevésünk helyességét. A következőkben kellő általánosítással a 4. axiómához jutunk el (induktív szemlélet!). Ugyanakkor látni fogjuk, hogy a „Kvantummechanika axiomarendszerének” az ismeretében a hullámfüggvény Born-féle értelmezése a 4. axiómából egzakt matematikával levezethető (deduktív szemlélet!).

Az előzőekben említett hullámcsomag szétfolyás tehát a megtalálási valószínűség időbeli szétterülését jelenti, ami pedig fizikailag igen szemléletes és érthető. Ezzel egy csapásra megszűnt a "hullám-részecske kettősség", feloldhatatlannak tűnő „misztikus” önellentmondása. Pontszerű részecskék vannak és a kvantummechanika ezen pontszerű részecskék megtalálási valószínűségét határozza meg az időfüggő Schrödinger egyenlet segítségével. Ezt a fizikai interpretációt támasztja alá az a szórás-kísérlet is, amikor vékony fólián egyenként elektronokat lövünk át. A fólia mögött elhelyezett felfogó ernyőn lehet a szóródó elektronok becsapódását detektálni. A kezdetben szabálytalanul elhelyezkedő becsapódási pontok nagyszámú egyedi elektron-becsapódás után szabályos interferencia gyűrűkké olvadnak össze. Az adott helyre beérkező elektronok száma az ottani megtalálási valószínűséggel lesz arányos.

Max Born (1882-1970) széleskörű matematikai ismeretekkel rendelkező fizikus volt.

A „matematikusok Mekkájában”, Göttingenben olyan nagyhírű „proféták” előadásait hallgatta, mint: Felix Klein, David Hilbert és Hermann Minkowski. A doktori munkáját a neves elméleti csillagász K. Schwarzschild vezetése alatt írta. Valószínűleg ennek a matematikai tudásának köszönhetette, hogy a „hullámfüggvény valószínűségi értelmezése” éppen az ő ötlete volt.

Mindezekkel kapcsolatban a következőket írja:

Schrödinger „az elektront nem részecskének, hanem az általa felírt hullámfüggvény $|\psi|^2$ négyzetével meghatározott sűrűségeloszlásnak tekintette....Én azonban naponta láttam, hogy Franck atomi és molekuláris ütközési kísérleteiben milyen termékeny szerepet játszik a részecske fogalom és meg voltam győződve, hogy a részecskéket nem lehet egyszerűen kiebrudalni. Módot kell találni a részecskék és a hullámok összebékítésére. Az összekötő láncszemet én a valószínűség fogalmában láttam....A hipotézist sikerült igazolni az ütközési folyamatoknak hullámok szóródásával való leírásával és más eljárásokkal....A ψ függvény általában adott statisztikus értelmezése csupán az első lépés volt az atomfizikában a részecskék és a hullámok közötti kapcsolat megértésében....Noha ezeket az elgondolásokat a fizikusok döntő többsége elfogadta, mindig volt néhány kivétel, közöttük olyan nagy nevek, mint Planck, Einstein, de Broglie és Schrödinger. Ez a magyarázata, hogy miért tartott huszonnyolc esztendeig amíg munkásságomért megkaptam a Nobel-díjat.”

Az 1954-es fizikai Nobel-díj átvételekor M.Born 72 éves(!) volt, az inoklásban ez állt: „alapvető kvantummechanikai munkásságáért, különös tekintettel a hullámfüggvény statisztikus interpretációjára.” Planck akkor már 7 éve halott volt. De Broglie 62, Einstein 75, Schrödinger 67 éves volt.

„Valamely tudományos igazság nem oly módon szokott érvényre jutni, hogy ellenfeleit meggyőzi és azok meggyőzöttnek jelentik ki magukat, hanem inkább úgy, hogy az ellenfelek lassanként kihalnak és a következő generáció kezdetektől fogva ezt az igazságot ismeri meg.” E kijelentés igazsága szépen igazolódott a kvantummechanika fejlődése során, a hatáskvantum bevezetésétől egészen a borni interpretációig. Az idézett sorok írója Max Planck volt.

A felsorolt „nagy nevek” is mutatják, hogy a kvantummechanika alapjában valószínűségi szemlélete nem tartozik a könnyen elfogadható fizikai interpretációk közé. Einstein közkedvelté vált mondasát szabadon idézve: nehezen elfogadható, hogy az „Isten kockajátékos”. M. Born kedvelte a filozófiát és megfelelő alapképzettséget is szerzett benne. Átérezte hipotézisének természet-filozófiai vonatkozásait is. Nem véletlenül írta a következőket:

„Még ha figyelmen kívül hagyjuk is a filozófiai szempontokat, a fizikában a sugárzás korpuszkuláris és hullámtulajdonságai közötti ellentmondás a statisztikus nézőpont nélkül nem oldható fel. ...Noha az új elmélet kísérletileg jól megalapozottnak látszik, mégis felvethető a kérdés, vajon az elmélet nem tehető-e ismét determinisztikussá a jövőben, további kiterjesztéssel vagy finomítással? Erre ezt válaszolhatjuk: egzakt matematikai számításokkal bebizonyítható, hogy a kvantummechanika ma elfogadott formalizmusa nem tesz lehetségessé ilyen kiegészítést. Ha tehát meg akarjuk őrizni a reményt, hogy a determináció egy napon visszatér, úgy a mai elméletet alapvetően tévesnek kell minősítenünk. Vagyis az elmélet egyes állításait kísérletekkel kellene megcáfolni. A deterministának tehát nem tiltakoznia, hanem kísérleteznie kell, ha meg akarja téríteni a statisztikus elmélet híveit.”

Tudománytörténeti érdekesség, hogy a „kvantummechanika” elnevezést először Born használta egy 1924-ben megjelent dolgozatában. Személyében tehát a „keresztapát” is tisztelhetjük.

OROSZ L. Kvantummechanika 14. oldal.

1.1.2. A hullámfüggvény matematikai tulajdonságai

Az időfüggetlen Schrödinger egyenlet egy lineáris (differenciál) egyenlet. Azaz, ha a „ ψ ” állapotfüggvény megoldása az egyenletnek, akkor a „ $c \cdot \psi$ ” szintén megoldás, ahol „ c ” egy komplex szám. A hullámfüggvény fizikai jelentéséből következik, hogy a $|\psi|^2$ (pszi abszolút értéke négyzetének) az egész térre vett integráljának egynek kell lennie. Az ilyen függvényeket „négyzetesen integrálhatónak”, hívjuk. Ez már (egy egységnyi abszolút értékű komplex szám erejéig) meghatározza a „ c ” komplex szám értékét.

Az időfüggetlen Schrödinger egyenlet egy ún. „sajátérték egyenlet”. A Hamilton operátor ugyanis a ψ állapotfüggvényt önmaga állandósorozásába, azaz $E \cdot \psi$ -be kell, hogy transzformálja. A lineáris (vektor) tereknél találkozhattunk már hasonló feladattal. Az ott használatos elnevezések analógiájára a ψ állapotfüggvényt „sajátfüggvénynek”, az E -t „sajátértéknek” hívjuk.

Az alábbiakban megvizsgáljuk $\hat{H}\psi = E \cdot \psi$ differenciálegyenletnek az általános matematikai tulajdonságait. Az egyenletben két ismeretlen mennyiség van, ezek a ψ függvény és az E állandó.

A megoldás menete a következő.

1.) Tetszőleges E (valós) esetére meghatározzuk a lehetséges ψ (matematikai) megoldásokat.

2.) A kapott matematikai megoldások közül kiválasztjuk azokat, amelyek eleget tesznek az előzőekben definiált regularitási feltételeknek. Ezeket a reguláris megoldásokat fizikai megoldásoknak is mondhatjuk, hiszen csak a reguláris ψ függvényekhez rendelhetünk fizikai állapotokat. Bizonyos esetekben ezen megoldásfüggvényekhez tartozó E sajátértékek megszámlálható halmazt alkotnak. Azaz az energiaszintek kvantáltak. Az ilyen állapotokat kötött állapotoknak nevezzük.

A kötött állapotokhoz tartozó állapotfüggvények matematikai jellegzetességeit egy „egydimenziós világ” esetben vizsgáljuk meg. Ez elég egyszerű ahhoz, hogy már az elemi analízis módszereivel boldoguljunk, ugyanakkor az eredményeink kellő általánosítással a „reális, háromdimenziós” világra is átvihetők.

A klasszikus newtoni mechanika szerint egy (az „ x ” tengely mentén mozgó) tömegpont csak olyan tartományban mozoghat, ahol a potenciális energiája kisebb, mint az E összenergiája. Ezért azt a tartományt, ahol a részecske potenciális energiája nagyobb, mint az összenergiája, „klasszikusan tiltott” tartománynak nevezzük. „Visszafordulási pontnak” hívjuk azokat a helyeket, ahol a potenciális energia éppen egyenlő az E összenergiával. Egy részecske kötött állapotban van, ha a klasszikus mozgási tartománya véges nagyságú.

Ennek legegyszerűbb esetét fogjuk tárgyalni.

Ebben az egydimenziós világban a kötött állapot ψ állapotfüggvénye valós függvény.

A valós állapotfüggvény második deriváltjának az előjele ($\psi'' > 0, \psi'' < 0$) meghatározza a függvény alakját (az „ x ” tengely felől nézve konvex vagy konkáv).

A regularitási feltételek miatt a hullámfüggvénynek a végtelenben zérushoz kell tartania, hiszen csak így lehet az állapotfüggvény négyzetének az integrálja egységnyi. Ez pedig a valószínűségi értelmezéshez elengedhetetlen.

A vizsgálat eredménye szerint a hullámfüggvény a klasszikusan tiltott tartományban monoton eltűnő, míg a klasszikus mozgás tartományában oszcillál az „ x ” (helykoordináta) tengely körül. Inflexiója van a függvénynek a visszafordulási pontokban és ott, ahol a függvény értéke zérus. Minél magasabb energiaszinthez tartozó állapotfüggvényt tekintünk, annál több oszcillációval rendelkezik.

OROSZ L. Kvantummechanika 15. oldal.

A kapott eredmények alapján megmondható, hogy az egyes energiaszintekhez milyen hullámfüggvény tartozik („egypúpú”, „kétpúpú” stb...)

Mivel a klasszikusan tiltott tartományban a hullámfüggvény csak a végtelenben tűnik el így a megtalálási valószínűség ebben a tartományban nem lesz nulla. Arra a meglepő eredményre juthatunk, hogy a kvantummechanika szerint a részecske véges valószínűséggel tartózkodhat abban a térrészben is, ahol a mozgási energiája negatív(!). Ahhoz, hogy ennek az állításnak reális fizikai tartalmat tulajdoníthassunk, szakítanunk kell a hagyományos tömegpont modellel.

Gyökeresen új szemléletet kell kialakítanunk magunkban!

EZ PEDIG A KVANTUMMECHANIKA SZEMLÉLETE.

OROSZ L. Kvantummechanika 16. oldal.

1.1.3. Egyszerű példák kötött állapotokra

1.1.3.1. Az egydimenziós potenciálvölgy.

Az ábrából látható, hogy kötött állapotról akkor beszélhetünk, ha a részecske energiája pozitív, és nagysága kisebb, mint a potenciálvölgy (potenciálgödör) magassága. A klasszikus mozgás tartománya az L hosszúságú szakasz. Az általános ismereteink alapján fel tudjuk rajzolni a hullámfüggvények várható alakját. Pontos matematikai kifejezésekhez a Schrödinger egyenlet megoldásával juthatunk.

Ennek menete a következő:

1. A potenciális energia szakaszonként van megadva (V_0 és zérus) ezért a differenciálegyenlet megoldását is szakaszonként keressük meg.
2. Tetszőleges, pozitív, de V_0 -nál kisebb E energia esetén az általános matematikai megoldások egyszerűen megkaphatók. Ezek exponenciális, szinusz vagy koszinusz függvények.
3. A regularitási feltételek teljesítésével a lehetséges matematikai megoldások közül kiválasztjuk a fizikai megoldásokat.

Jelen esetben a regularitási feltételek a következők:

- a hullámfüggvénynek a végtelenben el kell tűnnie,
- a potenciálvölgy határpontjaiban (0 és L) a hullámfüggvénynek és a deriváltjának is folytonosnak kell lennie.

Ezeknek a feltételeknek csak bizonyos E_1, E_2, E_3, \dots stb.... energiákhoz tartozó hullámfüggvények tesznek eleget. Ezek elemi matematikai (grafikus) eljárással egyszerűen meghatározhatók.

A V_0 nagyságától függően mindig véges számú kötött állapotot kapunk. És (ebben az egy dimenziós esetben) bármilyen alacsony is legyen a potenciálvölgy mélysége, egy kötött állapot mindig lesz.

OROSZ L. Kvantummechanika 17. oldal.

1.1.3.2. A potenciáldoboz

Az egydimenziós potenciálvölgyben mozgó elektron kvantummechanikai tárgyalása elég egyszerű feladatnak bizonyult. Tovább egyszerűsödik a matematikai munka, ha az ún. (egy dimenziós) "potenciáldoboz"-ba bezárt részecskét tárgyaljuk.

A potenciáldoboz a potenciálvölgyből kapható a $V_0 \rightarrow \infty$ határátmenettel.

Mivel a klasszikusan tiltott tartományban a potenciális energia végtelen nagy, ezért itt az állapotfüggvénynek azonosan nullának kell lennie. Reguláris megoldást ebben az esetben csak a $(0, L)$ tartományban kell keresnünk. Látható, hogy ebben a térrészben a potenciális energia zérus. A Schrödinger egyenlet általános matematikai megoldása elemi módon megkapható: $\psi(x) = A \cdot \sin(kx) + B \cdot \cos(kx)$. A regularitási feltételek szerint a tartomány határain a hullámfüggvénynek folytonosnak kell lennie. A deriváltak folytonosságát most nem kell megkövetelni, mert végtelen magas potenciálvölgyről van szó. Ennek megfelelően tehát a hullámfüggvény a 0 és L pontokban zérus kell, hogy legyen.

Végeredményül azt kapjuk, fizikai megoldás csak olyan szinusz függvény lehet, amely esetén a potenciáldoboz L hossza a ψ állapotfüggvény fél-hullámhosszának egész számú többszöröse. (Hasonlóan a két végén rögzített húr lehetséges rezgési módusaihoz). A reguláris (fizikai) megoldásfüggvényekhez tartozó energiaszintekre egy matematikai kifejezés adódik: $E = E_0 \cdot n^2$. Eszerint tehát a diszkrét energiaszintek értékei egy egész szám ($n = 1, 2, 3, \dots$) négyzetével arányosak. Azaz a lehetséges energiaszintek kvantálási szabálya egy $E(n)$ zárt matematikai képlettel fejezhető ki. Általában is igaz, hogy vannak olyan fizikai feladatok, amelyek esetén a kvantálási törvény zárt matematikai kifejezés alakjában megfogalmazható. Az itt megjelenő egész számot (ill. számokat) kvantumszámoknak nevezzük. Mindig meg kell adni a kvantumszámok lehetséges értékeit is, mert ezek mindig az illető fizikai feladattól függenek.

OROSZ L. Kvantummechanika 18. oldal.

A klasszikus mechanika szerint a potenciáldoboz belsejében, ahol a potenciális energia állandó (nevezetesen zérus), a részecskére nem hat erő. Ezért a sebessége állandó. Ebből az következik, hogy mindenhol ugyanakkora valószínűséggel található meg.

Az állapotfüggvény (Ψ hullámfüggvény) ismeretében a részecske megtalálási valószínűsége is meghatározható. Eredményül azt kapjuk, hogy a kvantummechanikai valószínűségsűrűség a klasszikus körül oszcillál méghozzá annál nagyobb térfrekvenciával, minél nagyobb a részecske energiája. Ez az észrevételünk általában is igaznak fog bizonyulni.

Az egydimenziós potenciáldobozban mozgó részecske klasszikus tárgyalásban két fal között pattogó tömegpontnak felel meg. Az imént kapott kvantummechanikai eredmények első pillantásra meglehetősen idegenek a klasszikus szemléletünk számára. A makroszkopikus világban a newtoni fizika eredményeit

tapasztaljuk, ezért azt várjuk, hogy a kvantummechanika makroszkopikus határesetben vissza kell, hogy adjon a klasszikus mechanika eredményeit. Érdekes tehát ezt megvizsgálni ebben az igen egyszerű és szemléletes esetben. A klasszikus határeset a mikroszkopikus energiaszintekhez képest nagy(?) energiát jelent. Ez azt jelenti, hogy a klasszikus mechanikával tárgyalható részecske energiája sokkal nagyobb, mint az alapállapotú energia (az első energiaszint!). Azaz az „ n ” kvantumszám sokkal nagyobb, mint egy.

Minden makroszkopikus mérés csak valamilyen véges relatív pontossággal végezhető el. Ez a mérőműszerek tulajdonsága. A makroszkopikus fizika szerint egy mérőműszer pontossága elvileg tetszőlegesen csökkenthető, de mindig véges marad. Ennek pusztán technikai okai vannak.

Az energiaszintek vonatkozásában azt kapjuk, hogy a makroszkopikus energiamérés esetén nagyon sok kvantált energiaszint esik a mérőműszer pontatlansági tartományába. Így makroszkopikus esetben az energia kvantáltsága kimérhetetlen lesz, azaz folytonos energiaskálat tapasztalunk.

Az állapotfüggvények szempontjából a nagy kvantumszám nagyon sűrű térbeli oszcillációt jelent. Ekkor a makroszkopikus helymérés pontatlansági tartományában a hullámfüggvénynek igen nagyszámú oszcillációja esik. Így a kvantummechanikai megtalálási valószínűség erre a tartományra vett átlaga éppen a klasszikus értéket adja. Azaz a klasszikus mechanika eredményeit fogjuk a makroszkopikus hosszúság skálán is tapasztalni.

Azt a kíváncsiságot, hogy az általánosabbnak és alapvetőbbnek tekintett kvantummechanika határesetben adja vissza a klasszikus mechanika eredményeit a „korrespondencia elvének” hívjuk, és gyakran használjuk eredményeink globális ellenőrzésére. Azaz egy mikrofizikai modell helyességének ez szükséges feltétele.

OROSZ L. Kvantummechanika 19. oldal.

A háromdimenziós potenciáldoboz az egydimenziósra a kézenfekvő általánosítása. Egy L élhosszúságú kocka alakú tartomány belsejében a potenciális energia zérus, azon kívül pedig végtelen. A Schrödinger egyenlet most egy háromváltozós parciális differenciálegyenlet. Ennek a megoldása a már részletezett szeparálással végezhető el. Feltételezzük tehát, hogy a $\psi(x, y, z)$ háromváltozós hullámfüggvény felírható három egyváltozós függvény szorzataként $\psi(x, y, z) = X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z)$. Mindhárom függvényre ugyanaz a közös differenciálegyenlet adódik, mint amit az egydimenziós esetben kaptunk. A regularitási feltételek is ugyanazok, mint az egydimenziós esetben voltak. Mivel három egyváltozós függvényt kell meghatározni így három kvantumszám fog az eredményeinkben megjelenni. Ezek egymástól függetlenül pozitív egész számok lehetnek. A lehetséges energiaszintek értékére az egydimenziós dobozhoz igen hasonló formula adódik:

$$E = E_0 \cdot (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2), \quad \{n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots\}$$

OROSZ L. Kvantummechanika 20. oldal

A háromdimenziós potenciáldoboz tárgyalása során egy új fogalommal a degeneráltság fogalmával ismerkedhetünk meg. Mint azt láttuk egy állapotot egy kvantumszám hármassal (három kvantumszám együtt) határoz meg. Különböző kvantumszám hármassal különböző állapotfüggvényeket adnak meg. Ugyanakkor lehetnek olyan különböző kvantumszám hármassal, amelyek ugyanakkora energia értéket eredményeznek. Azaz előfordulhat, hogy egy energiaértékhez (energiaszinthez) több állapotfüggvény tartozik. Ezt nevezzük degenerációnak.

Az elektronállapotok degenerációja a vizsgált rendszer (térbeli) szimmetriájának a következménye. Ez a kapcsolat olyan szoros és jellegzetes, hogy a rendszer szimmetriájának az ismeretében következtetni lehet az állapotfüggvények matematikai alakjára is. Ez a fontos észrevétel a magyar származású Wigner Jenő érdeme.

Wigner Jenő a kvantummechanika közismerten nagy egyénisége. A szimmetria megfontolásai annyira alapvetőnek bizonyultak, hogy a kidolgozott módszere a későbbiek során a kvantummechanikai számítások (az atomi elektronhéj és az atommagok) alapvető eszközévé vált.

A szimmetria tulajdonságok matematikai tárgyalása az ún. „csoporthelmélet” segítségével történik. A csoporthelmélet alapjait az 1832-ben, a 21 éves korában, párbajban megölt zseniális francia matematikus Evariste Galois [ejtése: GALOÁ] tette le. A csoporthelméletet E. Galois az ötöd- és magasabbfokú egyenletek algebrai megoldhatatlanságának a problémája vizsgálatához teremtette meg, amely azután hamarosan nélkülözhetetlenné vált a matematika egész területén és a XX. századi modern fizikában is. A wigner felismerés a csoporthelmélet továbbfejlődésének az ösztönzőjévé vált. Mára már egy igen hatékony matematikai apparátust sikerült kiépíteni.

Napjainkban a „szimmetriacsoportok” használata az elemi részek fizikájának alapvető eszközévé vált.

Az 1963.-évi fizikai Nobel-díjat Wigner Jenő kapta, indoklásul: „ az atommagok és az elemi részek elméletének fejlesztéséért, kivált az alapvető szimmetriaelvek felfedezéséért és alkalmazásáért.”

A következőkben az állapotfüggvény és a rendszer szimmetriájának a kapcsolatát fogjuk szemléltetni a jelenlegi ismereteinknek megfelelő, lehető legegyszerűbb szinten.

Tekintsük a háromdimenziós, kocka alakú potenciáldobozban lévő elektron (részecske) esetét. A rendszer szimmetriája azt jelenti, hogy ha egy geometriai transzformációval (forgatás, tükrözés) a kockát önmagába transzformáljuk, akkor ez semmiféle fizikai változást nem eredményez. Meg fogjuk nézni, hogy mi történik egy állapotfüggvénnyel a szimmetriatranszformációk során.

Egy adott energiaszinhez tartozó ψ hullámfüggvény ismeretében a részecske $P = |\psi|^2$ megtalálási valószínűség sűrűsége meghatározható. A $P(x, y, z)$ háromváltozós függvény ábrázolására az ún. szintfelületeket használjuk. Szintfelületnek nevezzük azon térbeli pontok összességét amelyek kielégítik a $P(x, y, z) = P_0$ egyenletet. Ezek a pontok egy térbeli felületet adnak. Mármint a ψ állapotfüggvény ábrázolása esetén felrajzoljuk azt a szintfelületet, amelyen belül az elektron „közel egy” (pl.: 0.95) valószínűséggel található meg.

A potenciáldoboz esetén a ψ hullámfüggvények matematikai alakja jól ismert. Ezek vizsgálata alapján a következőket vehetjük észre:

Alapállapotban minden szimmetriatranszformáció során a $|\psi_{000}|^2$ szintfelület önmagába transzformálódik.

A második energiaszinhez tartozó három (degenerált) állapotfüggvény olyan, hogy minden szimmetriatranszformáció során a $|\psi_{211}|^2, |\psi_{121}|^2, |\psi_{112}|^2$ szintfelületek egymásba transzformálódnak.

OROSZ L. Kvantummechanika 21.oldal

1.1.3.3. A harmonikus lineáris oszcillátor

A (egydimenziós) harmonikus lineáris oszcillátor esetén a potenciális energia az egyensúlyi helyzettől való eltérés (legyen x) négyzetével arányos. A klasszikus mechanikai tulajdonságai már jól ismertek. A mechanikában széles körben használjuk. Ennek oka a következő. Bármely két test közötti kölcsönhatás taszító és vonzó erők együttes fellépésének a következménye. E két erőhatás eredményeként a két test között stabil egyensúlyi állapot jöhet létre. Ebben az esetben a potenciálfüggvénynek az egyensúlyi helyzetben minimuma van. Az egyensúly helyzettől való kis kitérések esetén, a potenciálfüggvény egy parabolával közelíthető. Azaz a rendszer egy oszcillátornak tekinthető.

A kvantummechanikai tárgyalás esetén az időfüggetlen Schrödinger egyenletet kell megoldanunk. A potenciális energia helyére egy parabolikus (x^2 -től függő) függvényt kell beírunk. Ismeretlen az E energia és a ψ állapotfüggvény. Alkalmasan bevezetett állandók segítségével első pillanatra egyszerűnek tűnő differenciálegyenletet kapunk. Bár a differenciálegyenlet egyszerűnek látszik, megoldásával eddig még nem találkoztunk.

OROSZ L. Kvantummechanika 22.oldal

Az egyenlet megoldása pusztán eddigi matematikai ismereteink alapján igen nehéz lenne. Támaszkodhatunk azonban arra, amit a Schrödinger egyenlet általános matematikai vizsgálata során tapasztaltunk. Azaz tudjuk, hogy kötött állapot lévén az energiaszintek kvantáltak, és az állapotfüggvények "egypúpú", "kétpúpú", "hárompúpú", stb.. (valós)függvények lesznek. Mivel a potenciális energia szimmetrikus (páros függvény), könnyű belátni, hogy az állapotfüggvények páros és páratlan függvények lesznek. A legalacsonyabb energiaszinhez (az alapállapothoz) tartozó ψ függvény tehát egy "egypúpú" páros függvény kell, hogy legyen. Keressük ezt egy x^2 -től függő exponenciális függvény alakjában (ún. Gauss függvény). Közvetlen behelyettesítéssel igazolhatjuk, hogy a feltételezésünk helyes volt.

Ugyancsak megkapjuk az alapállapot energiáját. Ennek értéke $\hbar\omega$ **felével (!)** egyenlő. Tovább is próbálkozhatunk az állapotfüggvények felírásával. Hiszen, ha az alapállapothoz tartozó Gauss függvényt egy alkalmas (páros vagy páratlan) polinommal megszorozzuk, akkor mind szimmetriáját, mind pedig alakját tekintve a várt tulajdonságú hullámfüggvényeket (állapotfüggvényeket) kapjuk. Keressük tehát a megoldást egy ismeretlen polinom és az ismert Gauss függvény (alapállapot) szorzatának a formájában.

A feltételezett ψ_n függvényt beírva a Schrödinger egyenletbe (némi manipuláció után) az ismeretlen polinomra egy újabb differenciálegyenlet adódik. Ez első pillantásra bonyolultabb, mint a kezdeti, ψ_n -re vonatkozó egyenletünk. Nagy előnye azonban az, hogy a megoldásai ismeretesek. Ez ugyanis egy Hermite-féle differenciálegyenlet és a megoldásai H_n az ún. Hermite polinomok. Az egyenletben van még egy ismeretlen, ez az η_n . Ez tartalmazza a meghatározandó E_n energiát.

A későbbiekben sokszor kell majd megkeresnünk a Schrödinger egyenlet megoldásait. Ekkor természetesen már nem fogjuk a matematikai részleteket tárgyalni, hanem majd csak hivatkozunk arra a matematikai módszerre, amely alkalmazásával a megoldások magkaphatók. Ennek a neve az alábbiakban elmondandó ún. "polinom módszer". A módszert ezen a feladaton keresztül mutatjuk be.

A polinom módszer főbb lépései tehát a következők:

- 1.) A differenciálegyenlet megoldását egy hatványsor alakjában keressük, tehát meghatározandók a hatványsor együtthatói.
- 2.) A hatványsorba felírt keresett függvényt beírjuk a differenciálegyenletbe és elvégezzük a szükséges deriválásokat.
- 3.) Az így adódó, nullára redukált egyenletben az azonos hatványkitevőjű tagokat összevonjuk, így egyetlen hatványsort kapunk.. (Ennek oka az, hogy egy hatványsor deriváltja ismét hatványsor és hatványsorok összege ugyancsak hatványsor)
- 4.) Mivel egy hatványsor csak akkor azonosan egyenlő nullával, ha minden hatványtag együtthatója nulla. Így az együtthatókra egy ún. rekurziós összefüggést kapunk.
- 5.) Megkeressük az egyenlet polinom megoldásait. Azaz azokat, amelyeknél a hatványsor egy véges fokszámú polinom lesz.

A harmonikus lineáris oszcillátorra kapott megoldások jellegzetességei tehát a következők.

Az energiaszinteket az $E_n = \hbar\omega \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right)$, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ összefüggés adja meg.

Az alapállapot energiája ($n=0$) nem nulla, hanem véges érték. Ezt nevezik nullaponti energiának. Mivel ez a legalacsonyabb energia, ezért ez az oszcillátorból nem vonható el. Ez azt is jelenti, hogy az oszcillátor soha nincsen nyugalomban. Kis ún. alapállapot (nullaponti) rezgést mindig végez.

Az energiaszintek egymástól egyenlő távolságra helyezkednek el. Ez a távolság éppen $\hbar\omega$. Tehát az oszcillátor csak, $\hbar\omega$ nagyságú energiát tud leadni, vagy felvenni.

A kvantummechanikai megtalálási valószínűség sűrűség a klasszikus eredmény körül ingadozik.

1.1.4. Nem kötött állapotok tárgyalása

1.1.4.1. A valószínűségi áramsűrűség

Láttuk azt, hogy az elektron behatol a klasszikusan tiltott tartományba is. Így ha ez a tartomány véges szélességű, akkor az elektron ezen a tartományon véges valószínűséggel át is tud jutni. Ennek a jelenségnek a neve "alagút effektus". Az effektus azért kapta ezt a nevet, mert nem arról van szó, hogy a részecske "átugorja" a potenciálgátat. Az összenergiája ugyanis mindvégig állandó marad.

Ha a klasszikusan megengedett tartomány mérete "végtelen nagy", akkor ebben az esetben ún. nem kötött állapotok alakulnak ki. A hullámfüggvénynek a (kötött állapotok esetén definiált) valószínűségi értelmezése ekkor, minden további nélkül, már nem lehetséges. Ugyanis a hullámfüggvény nem lesz négyzetesen integrálható. A hullámfüggvény fizikai jelentésének az általánosításához új fogalmat kell bevezetnünk. Azaz meg kell szabadulnunk a négyzetesen integrálhatóságtól. Ez az új fogalom a "valószínűségi áramsűrűség".

Az egyszerűsítés miatt egydimenziós modellből fogunk kiindulni. Tekintsünk egy időtől függő állapotot. Ekkor a részecske megtalálási valószínűsége időben változni fog. A teljes térre vett valószínűség azonban állandó (kötött állapotok esetében éppen egy). Ez azt jelenti, hogy ha egy véges térrészben a megtalálási valószínűség, pl. csökken, akkor azon kívül nőnie kell. A jelenség úgy modellezhető, hogy a valószínűség mintegy "kiáramlik" az adott térrészből. Hasonlóan egy adott mennyiségű közeg zárt térben történő áramlásához.

Bevezethető a valószínűség áramlási sűrűsége („J”). Egydimenziós modell esetén egy dx nagyságú tartományban a megtalálási valószínűség időbeli megváltozása egyenlő a "beáramló" és a "kiáramló" valószínűségek összegével. Az így adódó egyenlet az ún. kontinuitási egyenlet.

OROSZ L. Kvantummechanika 27. oldal

Tudjuk, hogy a részecske állapotát a hullámfüggvény egyértelműen meghatározza. Tehát, az imént bevezetett „J” valószínűségi áramsűrűséget is a hullámfüggvény fogja megadni. Azaz ki kell deríteni a Ψ állapotfüggvény és a J valószínűségi áramsűrűség kapcsolatát. Tudjuk, hogy a Ψ -t az időfüggő Schrödinger egyenlet határozza meg, a J-t pedig a kontinuitási egyenlet definiálja. Tehát ha sikerül az időfüggő Schrödinger egyenletet egy kontinuitási egyenlet alakjába átírni, akkor ebből az utóbbiból ki lehet olvasni a J-nek a Ψ által definiált alakját. A számolás elvégezhető. Eredményül azt kapjuk, hogy a valószínűségi áramsűrűség egy valós mennyiség (ahogyan az kell is!) és nagyságát a Ψ hullámfüggvény és Ψ' annak helyszerinti deriváltja határozza meg.

$$J = \frac{\hbar}{2mj} (\Psi^* \cdot \Psi' - \Psi \cdot \Psi'^*)$$

Mint azt láttuk, egydimenziós kötött állapot esetén a Ψ valós függvény, így a J a valószínűségi áramsűrűség zérus

Az eredmények szemléletesen általánosíthatók háromdimenziós esetre.

OROSZ L. Kvantummechanika 28. oldal

Szemléltető példaként kiszámíthatjuk egy szabadon mozgó részecske esetén a valószínűségi áramsűrűséget. A Ψ állapotfüggvény most egy síkhullám lesz. Az általa definiált (valószínűségi) áramsűrűség egyszerűen meghatározható.

A kapott eredmény igen szemléletes. Az áramsűrűség ugyanis arányos lesz a részecske (De-Broglie által definiált) impulzusával és így a "v" sebességével, valamint a megtalálási valószínűség sűrűségével, azaz $J = v \cdot |\Psi|^2$. A valószínűségek tehát pontosan a klasszikus fizikából ismert áramsűrűség kifejezést kaptuk.

1.1.4.2. Áthaladás potenciálgáton (közelítő számítás)

A valószínűségi áramsűrűség bevezetése lehetővé teszi annak kiszámítását, hogy egy (az „x” tengely mentén mozgó) „ $E < V_0$ ” kinetikus energiájú részecske mekkora valószínűséggel jut át egy „ V_0 ” magasságú és

„ $L = x_2 - x_1$ ” szélességű ún. "négyzögletes potenciálgáton". A feladat értelemszerűen egydimenziós. Az átjutás valószínűségét T "transzmissziós tényezőnek" nevezzük. Ez természetesen egy 0 és 1 közé eső valós szám. Definíciójához egyszerű fizikai megfontolások alapján jutunk.

A potenciálgátra balról beeső részecske bizonyos valószínűséggel áthalad illetve visszaverődik a potenciálgáton. A beeső, a visszaverődő és az átjutás után eltávozó szabadon mozgó részecske kvantummechanikai leírása a megfelelő valószínűségi áramsűrűségekkel történik. A transzmissziót az eltávozó „ J_{EL} ” és a beeső „ J_{BE} ” valószínűségi áramsűrűségek hányadosaként definiáljuk. A potenciálgát szimmetrikus alakja miatt a gát mindkét oldalán a részecske sebessége ugyanakkora. Így az a számítás során kiesik. A ψ hullámfüggvény folytonossága miatt a transzmissziót a gáton belül számított, exponenciálisan csökkenő hullámfüggvény határozza meg. Mivel a hullámfüggvény deriváltjára (a gát széleinél) semmiféle kikötést nem tettünk, ezért az eredményünk csak egy közelítő érték lehet. Neve Gamow -féle közelítés.

A Gamow közelítés matematikai alakja a következőnek adódott: $T_G = \exp\left\{-\text{áll} \cdot \sqrt{V_0 - E} \cdot L\right\}$

Láthatóan, a potenciálgát „ L ” szélességének a növelésével az átjutás valószínűsége exponenciálisan csökken. Annak egyik jele, hogy a kapott összefüggés csakis egy közelítés lehet többek között az, hogy $E=0$ esetén $T_G > 0$. Az az állítás, hogy (szemléletesen szólva) egy álló részecske is átjuthat a gáton, még a kvantummechanikai szemléletünk szerint is hamis kell, hogy legyen.

OROSZ L. Kvantummechanika 29. oldal

A négyzögletes potenciálgátra kapott Gamow-féle eredmény segítségével közelítően meghatározhatjuk egy tetszőleges alakú potenciálgáton való áthaladás valószínűségét is.

A tetszőleges alakú potenciálgát ugyanis ige kicsiny „ dx ” szélességű négyzögletes gátak együtteseként fogható fel. Feltételezzük, hogy az egyes elemi gátakon való „ dT ” áthaladási valószínűségek szorozzódnak (lásd valószínűs égszámítás: független események együttes bekövetkezése!). Mivel az „ dT ” elemi valószínűségek exponenciális kifejezések, a $T_G = \prod dT$ szorzatuk is exponenciális kifejezés lesz. A kitevők összeadódnak és az eredő kitevő a gát alakjától és a részecske összenergiájától függő integrál lesz.

OROSZ L. Kvantummechanika 30. oldal

Az alagúteffektus egyik legszebb példája a hideg -(vagy tér-) emisszió jelensége, amikor elektrosztatikus tér hatására a fémből elektronok lépnek ki. A fém felületére merőleges, homogén, sztatikus elektromos tér potenciálja a fémen kívül lineáris lesz. A fémen belül az elektromos tér nulla. A fotóeffektusnál bevezetett potenciállépcső ennek megfelelően fog módosulni. A transzmissziós tényező az előzőekben tárgyalt

Ez az ún. Fowler-Nordheim formula. A számítások megegyeznek a mérési eredményekkel.

Az alagúteffektus a klasszikus fizikai szemlélet számára értelmezhetetlen és paradox jelenség. A mérési eredmények fényesen igazolják a kvantummechanikai szemléletünk helyességét. Létezése ma már trivialis.

OROSZ L. Kvantummechanika 31. oldal

1.1.4.3. Áthaladás potenciálgáton, potenciálvölgyön

Térjünk rá a négyzögletes (egydimenziós) potenciálgáton történő transzmisszió pontos tárgyalására.

A hullámfüggvény kiszámítására a már ismert módszert használjuk. Azaz először meghatározzuk a Schrödinger egyenlet általános, matematikai megoldásait, majd ezekből (a regularitási feltételek segítségével) kiválasztjuk a fizikailag értelmezhető megoldásokat. A véges potenciálugrások (lépcsők) a teret (az „ x ” tengelyt) három részre bontják. Az egyes tartományokon belül a Schrödinger egyenlet általános megoldásai egyszerűen megkaphatók. Mivel most nem kötött állapotról van szó, ezért a végtelen távoli pontokban a J valószínűségi áramsűrűségnek kell végesnek lenni (a négyzetes integrálhatóságot csak kötött állapotban kell teljesítenie az állapotfüggvénynek!). A regularitási feltételeket a potenciálugrások helyén (x_1 és x_2 pontokban) is teljesíteni kell,

azaz a ψ -nek folytonosan deriválhatónak kell lennie. A Gamow-féle közelítésben csak a ψ folytonosságát követeltük meg!

A transzmissziós tényezőt a már definiált módon határozzuk meg.

A T transzmissziós tényező értéke függ a beeső részecske „ E ” energiájától. A $T(E)$ függvény jellegzetes alakjának főbb fizikai tartalma a következő:

- 1.) Ha a beeső részecske energiája a potenciálgát magasságánál kisebb ($E < V_0$), akkor a részecske alagút effektus révén véges valószínűséggel átmehet a gáton. (Klasszikus esetben biztosan nem jut át!)
- 2.) Ha a beeső részecske energiája a potenciálgát magasságánál nagyobb ($E > V_0$), akkor a részecske csak bizonyos E_i energiákon képes biztosan áthaladni a gáton (Klasszikus esetben minden ilyen energián átjut!) A $T(E_i) = 1$ egyenlet megoldása egyszerű, és az eredmény igen szemléltetően értelmezhető.

OROSZ L. Kvantummechanika 32.oldal

A V_0 mélységű négyszögletes potenciálvölgy kötött állapotú megoldásaival már foglalkoztunk. Láthatóan vannak nem kötött állapotú megoldások is. A $T(E)$ transzmissziós tényező számítása ugyanúgy történik, mint a gát esetében. Az eredmények is nagyon hasonlóak az ott kapottakhoz.

A modern mikroelektronikában ma már használják az ún. rezonáns alagúteffektus jelenségét. Ekkor az elektronok két, egymáshoz "közel lévő", V_0 magasságú (egyforma) négyszögletes potenciálgáton haladnak át.

A kvantummechanikai számítások szerint vannak olyan $E_i < V_0$ energiaszintek, amelyekre $T(E_i) = 1$, azaz biztosan átmennek a két gáton. Ugyanakkor ezen energiaszintek esetén az elektronok viszonylag "sokáig" maradnak a két gát között. Mintha ott ideiglenesen kötött állapotba kerülnének. Innen van a „rezonáns alagúteffektus” elnevezés is.

Mindez tükröződik az elektronok (jól mérhető) makroszkopikus viselkedésében is, amely az elektronikus eszközökben kerül felhasználásra. A szilárd testben mozgó elektronok számára az effektushoz szükséges potenciálugrásokat (az ún. epitaxiális rétegnövesztés technológiájával) ma már élő tudják állítani. A hiányzó részletekkel a szilárdtestfizikai fejezet végén találkozunk majd.

V É G E A Z E L S Ő F Ü Z E T N E K