

Kvantummechanika feladatgyűjtemény

Szunyogh László, Udvardi László, Ujfalusi László, Varga Imre

2013. október 24.

Előszó

A fizikus alapképzésben központi jelentőségű a Kvantummechanika tárgy oktatása, hiszen a hallgatók itt sajátítják el a modern fizika tanulmányozásához szükséges alapok nagy részét. A megszerzett ismeretek nélkülözhetetlenek a szilárdtestfizika, a statisztikus fizika, az atom- és molekulafizika, a részecskefizika és a mesterképzés számos további tárgyának oktatásában. A mikrofizika törvényszerűségeinek és alapjelenségeinek megértése a gyakorlati feladatok megoldásán keresztül válik teljessé. Példatárunkban a BME fizikus képzés Kvantummechanika gyakorlatain az elmúlt közel húsz évben tárgyalt feladatokat gyűjtöttük össze. A kilenc fejezet Apagy Barna: Kvantummechanika [1] jegyzetéhez igazodik. A szokásosnál részletesebb elméleti bevezetők sok esetben azonban az utóbbi évek oktatásába beépített ismereteket is közvetítenek. A példatár összeállításánál természetesen támaszkodtunk a kitűnő és jól bevált magyar nyelvű példatárakra, mint a Constatinescu-Magyari: Kvantummechanika példatár [2] és az Elméleti Fizika III. példatár [3], de számos új feladat is gazdagítja a választékot. A feladatok részletes kidolgozásával a hallgatók önellenőrzését szándékoztuk elősegíteni. A jövőben további érdekes feladatokkal tervezzük a példatár folyamatos kiterjesztését. Reméljük, hogy példatárunk nemcsak a BME fizika oktatásában hasznosul, hanem az ország többi egyetemének fizikus hallgatói számára is értékes segédeszköz lesz.

A példatár a TÁMOP-4.1.2./1-11/1-2011-0064 pályázat keretében készült.

Tartalomjegyzék

Előszó	i
1. Matematikai alapok	1
1.1. Elmélet	1
1.1.1. A Hilbert-tér	1
1.1.2. Lineáris operátorok	2
1.2. Feladatok	9
1.2.1. Példák	9
1.2.2. Megoldások	11
2. A kvantummechanika axiómái, egyszerű kvantummechanikai rendszerek	16
2.1. Elmélet	16
2.1.1. A kvantummechanika axiómái	16
2.1.2. Az axiómák és szimmetriák következményei	18
2.1.3. Egyszerű kvantummechanikai rendszerek	20
2.1.4. A lineáris harmonikus oszcillátor	22
2.2. Feladatok	28
2.2.1. Példák	28
2.2.2. Megoldások	34
3. Reprezentációk és kvantummechanikai képek	59
3.1. Elmélet	59
3.1.1. Diszkrét reprezentációk	59
3.1.2. Koordináta reprezentáció	61
3.1.3. Impulzus reprezentáció	62
3.1.4. A Heisenberg-féle határozatlansági reláció	63
3.1.5. Kvantummechanikai képek	65

3.2. Feladatok	69
3.2.1. Példák	69
3.2.2. Megoldások	71
4. A perdület és spin	80
4.1. Elmélet	80
4.1.1. Definíciók és felcserélési relációk	80
4.1.2. Az impulzusmomentum operátorok sajátértékei	81
4.1.3. Az elektron spinje	84
4.1.4. Impulzusmomentum összeadási szabályok	84
4.2. Feladatok	89
4.2.1. Példák	89
4.2.2. Megoldások	90
5. A hidrogénatom spektruma és a többtestprobléma	99
5.1. Elmélet	99
5.1.1. A radiális Schrödinger-egyenlet	99
5.1.2. A hidrogénatom kötött állapotai	100
5.1.3. Többreszcseke rendszerek	103
5.1.4. Többelektronos rendszerek: Hartree módszer	105
5.2. Feladatok	108
5.2.1. Példák	108
5.2.2. Megoldások	111
6. Közelítő módszerek a kvantummechanikában	121
6.1. Elmélet	121
6.1.1. Variációs módszer	121
6.1.2. Stacionárius perturbációszámítás	122
6.1.3. Időfüggő perturbációszámítás	126
6.2. Feladatok	130
6.2.1. Példák	130
6.2.2. Megoldások	135
7. Szóráselmélet	150
7.1. Elmélet	150
7.1.1. Kontinuitási egyenlet, valószínűségi áramsűrűség	150

7.1.2.	Háromdimenziós potenciálszórás	151
7.1.3.	Parciális hullámok módszere	155
7.1.4.	Egydimenziós szórás, alagúteffektus	157
7.2.	Feladatok	161
7.2.1.	Példák	161
7.2.2.	Megoldások	163
8.	Mozgás elektromágneses térben	173
8.1.	Elmélet	173
8.1.1.	A kinetikus impulzus csererelációi	173
8.1.2.	A Hamilton operátor	174
8.1.3.	Kontinuitási egyenlet	176
8.1.4.	A hullámfüggvény mértéktranszformáció	177
8.1.5.	Mozgás homogén mágneses térben: a Landau nívók	178
8.2.	Feladatok	181
8.2.1.	Példák	181
8.2.2.	Megoldások	183
9.	Relativisztikus kvantummechanika	195
9.1.	Elmélet	195
9.1.1.	Lorentz-transzformáció	195
9.1.2.	A Klein-Gordon-egyenlet	196
9.1.3.	A Dirac egyenlet	196
9.1.4.	A Dirac-féle Hamilton-operátor	198
9.1.5.	A Dirac-egyenlet Lorentz-invarianciája	199
9.1.6.	Fizikai mennyiségek Lorentz-transzformációja	201
9.1.7.	Térbeli forgatások és a spin	201
9.1.8.	A szabad elektron	203
9.1.9.	A nem-relativisztikus közelítés	204
9.2.	Feladatok	207
9.2.1.	Példák	207
9.2.2.	Megoldások	208

1. fejezet

Matematikai alapok

1.1. Elmélet

1.1.1. A Hilbert-tér

A kvantummechanika axiomatikus felépítéséhez először az elmélet által használt matematikai eszköztárat tekintjük át, mely az irodalomban [4] bővebben megtalálható. Ennek legfontosabb eleme a Hilbert-tér, amely tulajdonképpen az euklideszi tér végtelen dimenziós általánosítása:

1.1. Definíció *Hilbert-tér: Skalárszorzzattal ellátott teljes, metrikus tér. A \mathcal{H} Hilbert térhez tartozó skalárszorzzat egy olyan $\mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ függvény, melyre igazak a következők:*

1. $\langle x | y \rangle = \langle y | x \rangle^*$
2. $\langle x_1 + x_2 | y \rangle = \langle x_1 | y \rangle + \langle x_2 | y \rangle$
3. $\langle x | \lambda y \rangle = \lambda \langle x | y \rangle$
4. $\langle x | x \rangle \geq 0 \quad (= 0 \Leftrightarrow |x\rangle = | \rangle_0)$

Azaz a skalár szorzat a második változóban lineáris, az első változóban konjugált lineáris, illetve pozitív definit, a Hilbert-tér nullelemére pedig bevezettük a $| \rangle_0$ jelölést.

A skalárszorzzatból norma származtatható, $\|x\| = \sqrt{\langle x | x \rangle}$, melyből távolság, $d(x, y) = \|x - y\|$. A Hilbert-tér ezen normához tartozó topológiában teljes (bármely Cauchy sorozat konvergens).

A továbbiakban a Dirac-féle jelölésmódot használjuk, ahol a Hilbert-tér vektorait a $|x\rangle$ szimbólommal (ket) jelöljük. A Riesz-féle reprezentációs tétel értelmében bármely \mathcal{H} -n ható lineáris funkcionál reprezentálható egy \mathcal{H} -beli vektorral való skalárszorzzással. Így a $\langle x |$ jelölés (bra) alatt azt az egyébként \mathcal{H} duálisában lévő lineáris funkcionált értjük, aminek hatása egy $|y\rangle$ vektorra a $\langle x | y \rangle$. A következőkben néhány példát mutatunk Hilbert-térre:

1.2. Példa \mathbb{C}^n , azaz a komplex elemű n hosszú vektorok tere a szokásos $\langle x | y \rangle = \sum_{i=1}^n x_i^* y_i$ skalárszorzzattal.

1.3. Példa ℓ^2 , ami a négyzetesen összegezhető sorok tere $\left(\sum_i |x_i|^2 < \infty\right)$ az $\langle x | y \rangle = \sum_i x_i^* y_i$ skalárszorzzattal. Ez tulajdonképpen az előző példa természetes végtelen dimenziós általánosítása. A tér kanonikus bázisa: $\delta_n = (0, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots)$, ahol az 1 az n -edik helyen áll.

1.4. Példa $L^2(\mathbb{R})$, a számegeyenesen négyzetesen integrálható függvények tere $\left(\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx < \infty\right)$ az $\langle f | g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x)dx$ skalárszorzzattal. A térnek egy bázisát adják az Hermite-függvények.

1.5. Példa $L^2([-1; 1])$, a $[-1; 1]$ intervallumon négyzetesen integrálható függvények tere $\left(\int_{-1}^1 |f(x)|^2 dx < \infty\right)$ az $\langle f | g \rangle = \int_{-1}^1 f^*(x)g(x)dx$ skalárszorzzattal. Ennek a térnek több hasznos bázisa is van, pl. a Legendre-polinomok vagy a harmonikus bázis: $\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\frac{k\pi}{2}}$, ahol $k \in \mathbb{Z}$.

1.6. Definíció Szeparábilis Hilbert-tér: Megszámálható bázissal rendelkező Hilbert-tér.

A továbbiakban csak szeparábilis Hilbert-térrel foglalkozunk. Bármely vektort kifejtethetünk a tér egy $\{|\phi_i\rangle\}$ bázisán: $|\Psi\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle$ (általánosított Fourier-sorfejtés). Ekkor rögzített bázis mellett $|\Psi\rangle$ -t helyettesíthetjük a c_i koordinátáiból álló vektorral, emiatt minden végtelen dimenziós szeparábilis Hilbert-tér izomorf az ℓ^2 térrel így egymással is. Úgy is mondhatjuk, hogy létezik „a” Hilbert-tér, és a fenti példák ezen tér különböző „izomorf megvalósításai”. A 3.1.1 és a 3.1.2 fejezetekben látni fogjuk, hogy ezen állítás biztosítja a Schrödinger-féle hullámmechanika és a Heisenberg-féle mátrixmechanika közötti átjárást. Míg előbbi esetében $L^2(\mathbb{R})$ -t, utóbbi esetében ℓ^2 -t használjuk.

1.1.2. Lineáris operátorok

1.7. Definíció Lineáris operátor: Az $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ operátor lineáris, ha $\forall \lambda_{1,2} \in \mathbb{C}$, és $\forall |x_{1,2}\rangle \in \mathcal{H}$ esetén $\hat{A}(\lambda_1 |x_1\rangle + \lambda_2 |x_2\rangle) = \lambda_1 \hat{A}|x_1\rangle + \lambda_2 \hat{A}|x_2\rangle$

Egy \hat{A} lineáris operátor adjungáltját (\hat{A}^\dagger) a következő egyenlet definiálja: $\langle x | \hat{A}y \rangle = \langle \hat{A}^\dagger x | y \rangle$. Ha \hat{A} értelmezési tartományán $(\mathcal{D}_{\hat{A}})$ $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, és $\mathcal{D}_{\hat{A}} \subset \mathcal{D}_{\hat{A}^\dagger}$, akkor \hat{A} szimmetrikus. Ha ezen felül $\mathcal{D}_{\hat{A}} = \mathcal{D}_{\hat{A}^\dagger}$ is igaz, akkor \hat{A} önadjungált. Korlátos operátorokra ez a két fogalom megegyezik, különbség csak nem korlátos operátorok esetén van.

1.8. Példa A \mathbb{C}^2 -n ható önadjungált operátorok, azaz a 2×2 -es önadjungált mátrixok között (az identitással együtt) bázist alkotnak az úgynevezett Pauli mátrixok:

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

1.9. Példa Az ℓ^2 -n ható önadjungált operátorokat reprezentálhatjuk önadjungált végtelen mátrókkal, a következő mátrix például (mint a 3.5. feladatban látni fogjuk) az impulzus operátor egy lehetséges reprezentációja:

$$\begin{pmatrix} 0 & i\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ -i\sqrt{1} & 0 & i\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & -i\sqrt{2} & 0 & i\sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & -i\sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

1.10. Példa Az $L^2(\mathbb{R})$ téren két fontos nem korlátos önadjungált operátorra mutatunk példát. Az önadjungáltság bizonyítása megtalálható az irodalomban [4].

Az első a koordinátával való szorzás operátora: $\hat{x}f(x) = x \cdot f(x)$, ha $f(x)$ és $xf(x) \in L^2$.

A második a differenciál operátor: $\hat{p}f(x) = \frac{1}{i} \frac{df(x)}{dx}$, ha $f(x) \in L^2$ és $f'(x) \in L^2$

1.11. Definíció *Spektrum:* Egy $\lambda \in \mathbb{C}$ komplex szám az \hat{A} lineáris operátor spektrumában van, ha az $\hat{A} - \lambda \cdot \hat{I}$ operátornak nem létezik inverze. Az \hat{A} operátor spektrumát $\sigma_{\hat{A}}$ -val jelöljük, emellett a spektrum sosem üres. A spektrumot 3 részre osztjuk aszerint, hogy miért nem létezik $\hat{A} - \lambda \cdot \hat{I}$ inverze:

1. *Pontspektrum:* Létezik olyan λ szám, hogy $\hat{A}|x\rangle = \lambda|x\rangle$, azaz $\text{Ker}(\hat{A} - \lambda \cdot \hat{I}) \neq \{0\}$. Ekkor λ -t sajátértéknek, $|x\rangle$ -et sajátvektornak mondjuk, a sajátértékek összessége a pontspektrum. Ha \mathcal{H} véges dimenziós, akkor a rajta ható operátoroknak (mátrixoknak) csak pontspektrumuk van.
2. *Folytonos spektrum:* λ a folytonos spektrumhoz tartozik, ha $\text{Ker}(\hat{A} - \lambda \cdot \hat{I}) = \{0\}$, és $\text{Rng}(\hat{A} - \lambda \cdot \hat{I})$ egy sűrű altere \mathcal{H} -nak. Ekkor nincs olyan λ szám, és $|x\rangle \in \mathcal{H}$ vektor melyre $\hat{A}|x\rangle = \lambda|x\rangle$, de létezik Hilbert-térbeli vektoroknak olyan $|x_n\rangle$ sorozata, melyre $\|(\hat{A} - \lambda \cdot \hat{I})|x_n\rangle\| \rightarrow 0$. Ekkor tehát nincs sajátérték és sajátvektor, csak *approximatív sajátérték*, illetve *approximatív sajátvektor*.
3. *Reziduális spektrum:* λ a reziduális spektrumhoz tartozik, ha $\text{Ker}(\hat{A} - \lambda \cdot \hat{I}) = \{0\}$, és $\text{Rng}(\hat{A} - \lambda \cdot \hat{I})$ nem sűrű altere \mathcal{H} -nak.

Önadjungált operátoroknak csak pont- és folytonos spektruma van, emellett spektrumuk mindig valós.

Nézzünk néhány példát a fentiekre! Elsőként a pontspektrumra mutatunk egy egyszerű példát, majd a folytonos spektrumra látunk két igen fontos esetet: az 1.10. példa koordinátával való szorzás operátora, illetve a differenciál operátor.

1.12. Példa Tekintsük a Laplace-operátort (-1) -szeresét a $\mathcal{D} = \{f \in L^2[0, L], f'' \in L^2[0, L], f(0) = f(L) = 0\}$ értelmezési tartományon. Ekkor a

$$-\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \lambda f(x) \quad (1.3)$$

egyenletet kell megoldanunk $f(0) = f(L) = 0$ peremfeltétellel. Ennek megoldása a szokásos $f(x) = A \sin(kx)$ ansatz behelyettesítésével történik, a megoldások:

$$f_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad \lambda_n = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \quad n \in \mathbb{N} \quad (1.4)$$

Ezen megoldások tehát a pontspektrumhoz tartoznak.

1.13. Példa Vizsgáljuk a koordinátával való szorzás operátorát a $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ téren. Korábban említettük, hogy ez az operátor önadjungált, emiatt csak pont- és folytonos spektruma lehet. Könnyen megmutathatjuk, hogy pontspektruma (így sajátfüggvénye) nincsen, mivel az

$$x \cdot f(x) = \lambda \cdot f(x) \quad (1.5)$$

egyenlet megoldása egy $\delta(x - \lambda)$ disztribúcióhoz hasonló dolog lenne, mely nem eleme az $L^2(\mathbb{R})$ térnek (lévén hogy nem is függvény). Mivel a spektrum sosem üres, folytonos spektrumnak még lennie kell, melynek megtalálásához jó kiindulási pontot ad az (1.5) egyenlet. A folytonos spektrum keresésekor ugyancsak olyan Hilbert-térbeli vektorsorozatot keresünk, ami kielégíti a

$$\|(x - \lambda) \cdot f_{\lambda,n}(x)\| \rightarrow 0 \quad (1.6)$$

egyenletet, amire megfelelő egy n növelésével egyre magasodó és szűkülő lépcső (lásd 1.1 (a) ábra). Ha egyre normált approximatív sajátfüggvényekkel akarunk dolgozni, akkor a lépcső magassága \sqrt{n} :

$$f_{\lambda,n}(x) = \sqrt{n} \cdot \mathbb{1}_{\lambda, \frac{1}{n}} \quad , \quad \text{ahol } \mathbb{1}_{\lambda, \frac{1}{n}} = \begin{cases} 1 & \text{ha } \lambda \leq x \leq \lambda + \frac{1}{n} \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases} \quad (1.7)$$

Ha a normáltság nem fontos, akkor vehetjük a lépcsők magasságán n -nek, ekkor a sorozat egy Dirac-delta közelítő sorozat: $g_{\lambda,n}(x) = n \cdot \mathbb{1}_{\lambda, \frac{1}{n}}$. Ekkor azonban a (1.6) egyenletben szereplő norma nem 0-hoz tart, hanem n -nel arányosan divergál. Később azonban látjuk majd, hogy formális értelemben hasznos lehet ez a kép is. A normáltságba $|\lambda\rangle$ -t illetve $|\mu\rangle$ -t írva azt kapjuk, hogy

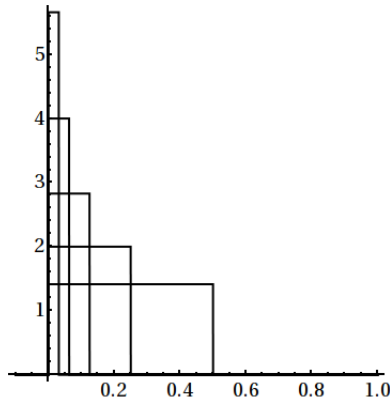
$$\langle \lambda | \lambda' \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle f_{\lambda,n} | f_{\lambda',n} \rangle = \delta_{\lambda,\lambda'} = \begin{cases} 1 & \text{ha } \lambda = \lambda' \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases} \quad (1.8)$$

$$\langle \mu | \mu' \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle g_{\lambda,n} | g_{\lambda',n} \rangle = \delta(\lambda - \lambda') \quad (1.9)$$

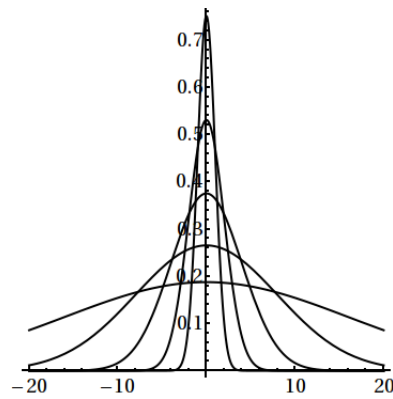
Az érvelés tetszőleges $\lambda \in \mathbb{R}$ -re működik, így a spektrum tisztán folytonos és lefedi a teljes \mathbb{R} -t.

1.14. Példa Határozzuk meg most az $L^2(\mathbb{R})$ -en értelmezett deriválás operátor spektrumát! A koordinátával való szorzás operátorához hasonlóan itt sem találunk pontspektrumot, hiszen a

$$\frac{1}{i} \frac{df(x)}{dx} = \lambda f(x) \quad (1.10)$$



(a)



(b)

1.1. ábra. (a) Az \hat{x} koordinátával való szorzás operátorának approximatív sajátfüggvényeit közelítő egyre magasodó lépcsők. A lépcsők helyett választhatunk egyre szűkülő és egyre magasodó Gauss-függvényeket is. (b) A \hat{p} deriválás operátorának approximatív sajátfüggvényeit közelítő egyre szélesedő Gauss-függvények.

sajátérték egyenletnek $e^{i\lambda x}$ síkhullám lenne a megoldása, de $\int \|e^{i\lambda x}\|^2 dx = \int 1 dx = \infty$, azaz $e^{i\lambda x}$ nem eleme az $L^2(\mathbb{R})$ térnek. Az előbbi példához hasonlóan itt is találhatunk approximatív sajátfüggvényeket, mégpedig síkhullámhoz hasonló függvényt közelítő sorozatot. Szorozzuk meg az előző síkhullámot egy egyre növekvő szórású Gauss-függvényekből álló sorozattal (lásd 1.1 (b) ábra). Ha az egységnyire normálás fontos, akkor:

$$f_{\lambda,n}(x) = \frac{1}{(2\pi n^2)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{x^2}{4n^2}} \cdot e^{i\lambda x} \quad (1.11)$$

Ha a normálás nem fontos, akkor használhatjuk például egy Delta közelítő Gauss-sorozat Fourier-transzformáltját szorzótényezőként: $g_{\lambda,n}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi n}} e^{-\frac{x^2}{2n^2}} \cdot e^{i\lambda x}$ Itt is tehát csak folytonos spektrum van, és mivel a λ helyébe bármilyen valós szám tehető, a spektrum itt is a teljes \mathbb{R} .

Korábban láttuk, hogy a deriválás operátor approximatív sajátfüggvényei egyre szélesedő Gauss-függvények. A koordinátával való szorzás approximatív sajátfüggvényeinek pedig választhatunk akár egyre szűkülő lépcsők helyett egyre szűkülő Gauss görbéket is, melyek épp az egyre táguló Gaussok Fourier-transzformáltjai. Különleges kapcsolat sejlik fel tehát a két operátor között, megmutatható, hogy a két operátor egymás Fourier-transzformáltja. Ez később a Heisenberg-féle határozatlanási relációval lesz kapcsolatban, melyet a 3.1.4 fejezetben részletezünk.

1.15. Tétel A spektrál tétel a lineáris algebrából jól ismert spektrál felbontás általánosítása Hilbert-terekre. A véges dimenziós esetből tudjuk, hogy egy A önadjungált mátrix sajátvektorai, $\{|i\rangle\}$, ortonormált bázist alkotnak, azaz bármely $|x\rangle$ vektor előállítható $|x\rangle = \sum_{i=1}^n c_i |i\rangle$ alakban, ahol $c_i = \langle i | x \rangle$. Azaz $Ax = \sum_{i=1}^n c_i A|i\rangle = \sum_{i=1}^n c_i \lambda_i |i\rangle$, tehát

$$A = \sum_{i=1}^n \lambda_i |i\rangle \langle i| \quad (1.12)$$

Itt az $E_i = |i\rangle\langle i|$ az $|i\rangle$ vektor önmagával vett diadikus szorzást jelenti, és mivel ezen E_i mátrixok páronként merőleges vetítések, azt is mondhatjuk, hogy az A operátor felírható a sajátalterekre vetítő ortogonális projekciók összegeként.

Amíg csak pontspektrum van, végtelen dimenzióban tulajdonképpen ugyan ez a helyzet, csak az (1.12) egyenletben egy végtelen szumma szerepel:

$$\hat{A} = \sum_{i=1} \lambda_i |i\rangle\langle i| \quad (1.13)$$

Folytonos spektrum esetén kicsit komplikáltabb a helyzet, nincsenek ugyanis sajátfüggvények, amik ortogonális bázist alkotnának. Vannak azonban approximatív sajátfüggvények, melyekre az (1.13)-hoz hasonló, projekciókat tartalmazó szummát felírva közelíthető az \hat{A} önadjungált operátor. Ezen szummát finomítva projekciók egy spektrumon vett integráljához jutunk határértékben. Ennyi kvalitatív magyarázat után kimondjuk pontosan is a spektrál tételt:

Legyen \hat{A} egy önadjungált operátor. Ekkor létezik egy olyan $d\hat{E}$ projektormérték, melyre

$$\hat{A} = \int_{\lambda \in \sigma_{\hat{A}}} \lambda d\hat{E}(\lambda) \quad (1.14)$$

Ettől kicsit több is igaz, \hat{A} -nak tetszőleges $f \in C(\sigma_{\hat{A}})$ spektrumon folytonos függvénye felírható egy ilyen integrállal:

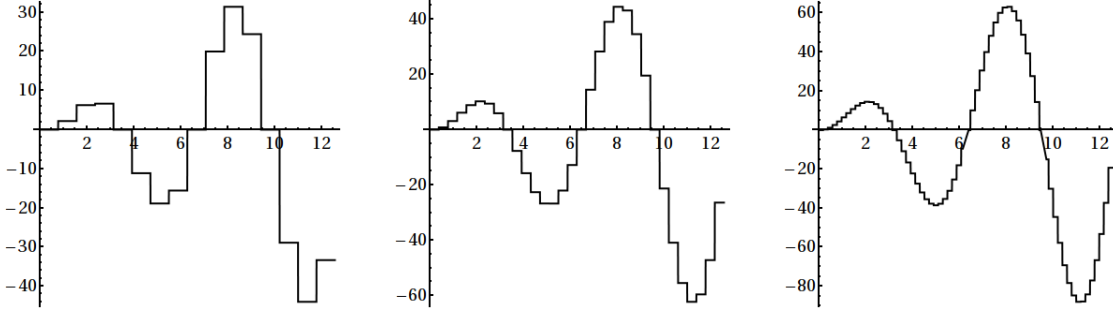
$$f(\hat{A}) = \int_{\lambda \in \sigma_{\hat{A}}} f(\lambda) d\hat{E}(\lambda) \quad (1.15)$$

1.16. Példa Tekintsük a \hat{I} identitás operátor két spektrál felbontását! Mivel az identitás minden sajátértéke 1, az $L^2(\mathbb{R})$ valamely megszámlálható elemű $|\lambda_i\rangle$ bázisán (pl. Hermite-függvényeken) kifejtve a következőt kapjuk:

$$\hat{I} = \sum_i |\lambda_i\rangle\langle \lambda_i| \quad (1.16)$$

Hogy könnyebben elképzelhessük, hogy hogyan is lehet egy projektormértékre vett integrálként előállítani egy operátort, megmutatjuk az (1.13)-hez hasonló szumma finomodását is az identitás példáján. Mivel az identitás operátornak minden vektor sajátvektora, a projektorkkal való kifejtéshez tetszőleges bázist használhatunk. Mivel most egy folytonos kifejtést szeretnénk vizsgálni, használjuk a koordináta operátor approximatív sajátfüggvényeit: közelítsük $|\lambda_i\rangle$ -t az (1.7) egyenletben szereplő $|\lambda_{i,n}\rangle = f_{\lambda_{i,n}}(x)$ -szel.

$$\hat{I} = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_i |\lambda_{i,n}\rangle\langle \lambda_{i,n}| \quad (1.17)$$



1.2. ábra. Az (1.17) egyenletben szereplő $\sum_i |\lambda_{i,n}\rangle \langle \lambda_{i,n}| \sin(x)$ finomodása n növekedésével. Látható, hogy az eredmény $\sin(x)$ -hez tart, így $\sum_i |\lambda_{i,n}\rangle \langle \lambda_{i,n}| \rightarrow \hat{I}$ teljesül.

Ezt egy tetszőleges $|\Psi\rangle$ vektorra hattanva:

$$|\Psi\rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_i |\lambda_{i,n}\rangle \langle \lambda_{i,n}| \Psi\rangle = \quad (1.18)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_i \int dx \sqrt{n} \mathbb{1}_{\lambda_i, \frac{1}{n}}(x) \cdot \Psi(x) \cdot \sqrt{n} \mathbb{1}_{\lambda_i, \frac{1}{n}}(y) = \quad (1.19)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_i \mathbb{1}_{\lambda_i, \frac{1}{n}}(y) \underbrace{\int dx \underbrace{n \mathbb{1}_{\lambda_i, \frac{1}{n}}(x)}_{\rightarrow \delta(x-\lambda_i)} \cdot \Psi(x)}_{\rightarrow \Psi(\lambda_i)} \quad (1.20)$$

Ez a szumma tulajdonképpen az $\Psi(x)$ függvényt közelíti téglaozszegekkel. Az 1.2. ábrán ezt láthatjuk $\Psi(x) = \sin(x)$ esetén.

Ha azonban (1.19)-et megszorozzuk és el is osztjuk n -nel, akkor a következőt kapjuk:

$$|\Psi\rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_i \frac{1}{n} \int dx n \mathbb{1}_{\lambda_i, \frac{1}{n}}(x) \cdot \Psi(x) \cdot n \mathbb{1}_{\lambda_i, \frac{1}{n}}(y) \quad (1.21)$$

Így éppen a nem normált Delta közelítő sorozat jelenik meg $|\lambda_{i,n}\rangle = g_{\lambda_{i,n}}(x)$! A $|\delta_\lambda(x)\rangle = \delta(x-\lambda)$ jelölést bevezetve egy (1.16)-hez nagyon hasonló alakot kapunk:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_i \underbrace{\frac{1}{n} n \mathbb{1}_{\lambda_i, \frac{1}{n}}(y)}_{\rightarrow \int f d\lambda} \underbrace{\int dx n \mathbb{1}_{\lambda_i, \frac{1}{n}}(x) \cdot \Psi(x)}_{\rightarrow \delta(x-\lambda)} = \quad (1.22)$$

$$= \int d\lambda \delta(y-\lambda) \int dx \delta(x-\lambda) \Psi(x) = \int d\lambda |\delta_\lambda\rangle \langle \delta_\lambda| \Psi\rangle \quad (1.23)$$

$$\hat{I} = \int d\lambda |\delta_\lambda\rangle \langle \delta_\lambda| \quad (1.24)$$

Ilyen értelemben értelmes azt mondanunk, hogy a Dirac-delta az x operátor sajátfüggvénye. Fontos azonban megjegyezni, hogy az itt szereplő $|\delta_\lambda\rangle \langle \delta_\lambda|$ nem fogható fel infinitezimális projekcióként, hiszen az ezeket közelítő $|g_{\lambda_{i,n}}\rangle$ vektorok normája nem egységnyi. Ehelyett $d\lambda |\delta_\lambda\rangle \langle \delta_\lambda|$ -ra tekinthetünk úgy, mint egy értelmes infinitezimális projekcióra.

1.17. Tétel *Mátrixok elméletéből tudjuk, hogy felcserélhető önadjungált mátrixoknak van közös ortonormált sajátbázisa.*

Azaz ha \hat{A} és \hat{B} önadjungált mátrixok kommutálnak, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$, akkor létezik egy ortonormált bázis, melynek tagjai mind \hat{A} -nak, mind \hat{B} -nek sajátfüggvényei. Így bármely vektor kifejezhető \hat{A} és \hat{B} közös sajátbázisán, ami sok esetben megkönnyíti a számolásokat.

Bizonyítás. Az állítás bizonyításához tekintsük \hat{A} és \hat{B} λ_i illetve μ_i sajátértékeit, és az ezekhez tartozó $|\varphi_i\rangle$ illetve $|\vartheta_i\rangle$ sajátvektorokat. Az egyszerűség kedvéért nézzük azt az esetet, amikor nem degeneráltak a sajátalterek, vagyis minden λ_i és μ_i különböző i -re.

$$\left(\hat{A} - \lambda_i\right) |\varphi_i\rangle = 0 \quad \left(\hat{B} - \mu_j\right) |\vartheta_j\rangle = 0 \quad (1.25)$$

Mivel a $\{|\vartheta_j\rangle\}$ ortonormált bázist alkot, $|\varphi_k\rangle$ kifejezhető ezen:

$$|\varphi_k\rangle = \sum_{m=1}^N c_m |\vartheta_m\rangle \quad (1.26)$$

Ezt beírva \hat{A} sajátértékegyenletébe, majd \hat{B} -t hattatva és $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ -t alkalmazva:

$$\left(\hat{A} - \lambda_k\right) |\varphi_k\rangle = \left(\hat{A} - \lambda_k\right) \sum_{m=1}^N c_m |\vartheta_m\rangle = 0 \quad (1.27)$$

$$\begin{aligned} \hat{B} \left(\hat{A} - \lambda_k\right) |\varphi_k\rangle &= \sum_{m=1}^N \hat{B} \left(\hat{A} - \lambda_k\right) c_m |\vartheta_m\rangle = \left(\hat{A} - \lambda_k\right) \sum_{m=1}^N c_m \hat{B} |\vartheta_m\rangle = \\ &= \left(\hat{A} - \lambda_k\right) \sum_{m=1}^N \mu_m c_m |\vartheta_m\rangle = 0 \end{aligned}$$

Ezt összevetve az (1.27) egyenlettel a következőt kapjuk: Világos, hogy mindkét kifejezés csak úgy lehet nulla egyszerre, ha az m -re való szummából csak egy tag nem zérus, így $|\varphi_k\rangle = c_k |\vartheta_k\rangle$, ahol $|c_k| = 1$ a normáltság miatt. Mivel egy fázisfaktorban különböző vektorok ugyanazt az állapotot írják le, c_k választható 1 -nek. \square

Egyszerűen belátható, hogy az állítás degenerált spektrumra, illetve végtelen dimenzióra is igaz, amennyiben csak pont spektrum van. Ha azonban folytonos spektruma is van az operátornak, akkor ehhez nem tartoznak sajátfüggvények, így az állítás eleve nem értelmes. A spektrális felbontással való előállítás azonban itt is működik, a spektráltételen keresztül. Általánosan tehát az igaz, hogy amennyiben \hat{A} és \hat{B} önadjungált operátork, létezik egy olyan $d\hat{E}(\cdot)$ projektor értékű mérték, mellyel \hat{A} és \hat{B} is előállítható: $\hat{A} = \int_{\sigma_{\hat{A}}} \lambda d\hat{E}(\lambda)$ és $\hat{B} = \int_{\sigma_{\hat{B}}} \mu d\hat{E}(\mu)$.

A továbbiakban elhagyjuk az operátorokról a $\hat{\cdot}$ jelölést, csak akkor írjuk ki rájuk, ha valami miatt fontosnak tartjuk hangsúlyozni operátor mivoltukat, vagy ha esetleg össze lehet téveszteni őket hasonlóan jelölt skalárokkal. Ezen kívül a következő fejezetekben gyakran nem bizonyítjuk expliciten az önadjungáltságot, csak a szimmetrikusságot, melyre a (fizikus szakzsargonnak megfelelően) a hermitikus szót használjuk majd legtöbbször. Mindig tartunk azonban észben, hogy a kvantummechanika konzisztens felépítéséhez önadjungált operátorokra van szükségünk, melyre ezen a fejezet feladatai közt is fogunk példákat látni.

1.2. Feladatok

1.2.1. Példák

1.1. Feladat Bizonyítsa a következő operátorazonosságot: $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$!

1.2. Feladat Igazoljuk, hogy tetszőleges A és L operátorokra fennáll az

$$e^L A e^{-L} = A + [L, A] + \frac{1}{2!} [L, [L, A]] + \frac{1}{3!} [L, [L, [L, A]]] + \dots$$

azonosság! A fenti összefüggést Hausdorff kifejtésnek hívjuk.

Segítség: Fejtsük sorba az $F(s) = e^{sL} A e^{-sL}$ függvényt!

1.3. Feladat Mutassuk meg, hogy ha

$$[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0,$$

akkor igaz az úgynevezett Baker-Campbell-Hausdorff azonosság:

$$e^{A+B} = e^{-\frac{1}{2}[A,B]} e^A e^B$$

Segítség: Vizsgáljuk meg a $T(s) = e^{sA} e^{sB}$ kifejezés s szerinti deriváltját, majd alkalmazzuk az 1.2. feladat azonosságát.

1.4. Feladat A (2.1.3) fejezetben megmutatjuk, hogy egy dimenzióban az impulzus operátorra (P) és koordináta operátorra (Q) épp az 1.10. példa deriválás és szorzás operátora (egy \hbar szorzótól eltekintve):

$$Q = x, \quad P = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad (1.28)$$

A (2.21) egyenletből láthatóan fennáll köztük a Heisenberg-féle felcserélési összefüggés:

$$[P, Q] = \frac{\hbar}{i} I, \quad (1.29)$$

ahol I az identitás operátor. A nyom-képzés ciklikus tulajdonsága miatt egyrészt

$$\text{Tr}[P, Q] = \text{Tr}(PQ) - \text{Tr}(QP) = 0, \quad (1.30)$$

másrészt viszont

$$\text{Tr}\left(\frac{\hbar}{i} I\right) = \frac{\hbar}{i} \text{Tr}(I) \neq 0. \quad (1.31)$$

Mi az ellentmondás feloldása?

1.5. Feladat *Definiáljuk az*

$$f(x) = \sum_{n=2}^{\infty} f_n(x) \quad (1.32)$$

függvényt, ahol

$$f_n(x) = \begin{cases} 1 + n^2(x - n) & \text{ha } n - \frac{1}{n^2} < x < n \\ 1 - n^2(x - n) & \text{ha } n \leq x \leq n + \frac{1}{n^2} \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases} . \quad (1.33)$$

Belátható, hogy f folytonos és négyzetesen integrálható, azaz $f \in L^2(\mathbb{R})$. Ugyanis

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_n(x)^2 dx = 2n^4 \int_0^{\frac{1}{n^2}} x^2 dx = \frac{2}{3} \frac{1}{n^2} \quad (1.34)$$

és

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)^2 dx = \frac{2}{3} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{2}{3} \left(\frac{1}{6} \pi^2 - 1 \right) . \quad (1.35)$$

Ezenfelül f az $x = n - \frac{1}{n^2}, n$ és $n + \frac{1}{n^2}$ ($n = 2, 3, \dots$) pontokban véges szakadással differenciálható. Naivan azt várnánk tehát, hogy benne van az impulzus operátor értelmezési tartományában. Miért nem lesz ez mégsem igaz?

1.6. Feladat *Definiáljuk az*

$$A = PQ^3 + Q^3P \quad (1.36)$$

operátort, ahol P és Q rendre az impulzus és koordináta operátor. Mivel P és Q önadjungált, A is az

$$A^\dagger = (PQ^3 + Q^3P)^\dagger = Q^3P + PQ^3 = A , \quad (1.37)$$

sajátértékei valósak. Lássuk be, hogy az

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} |x|^{-3/2} \exp\left(-\frac{1}{4x^2}\right) & \text{ha } x \neq 0 \\ 0 & \text{ha } x = 0 \end{cases} \quad (1.38)$$

függvény négyzetesen integrálható és

$$Af = \frac{\hbar}{i} f . \quad (1.39)$$

Vagyis azt kapjuk, hogy egy önadjungált operátornak komplex a sajátértéke. Mi az ellentmondás feloldása?

1.7. Feladat a) *Tekintsük a $P_{[0,1]} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ operátort a*

$$D(P_{[0,1]}) = \{ \psi \in L^2([0,1]) \mid \psi' \in L^2([0,1]) \text{ és } \psi(0) = \psi(1) = 0 \} \quad (1.40)$$

értelmezési tartományon. Lásza be, hogy $P_{[0,1]}$ szimmetrikus, de nincs sajátértéke, ugyanakkor a $P_{[0,1]}^\dagger$ operátor sajátérték halmaza a teljes komplex számhalmaz!

b) Bizonyítsa be, hogy a $P_\alpha = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ operátor a

$$D(P_\alpha) = \{ \psi \in L^2([0, 1]) \mid \psi' \in L^2([0, 1]) \text{ és } \psi(1) = e^{i\alpha} \psi(0) \} \quad (1.41)$$

értelmezési tartománnyal bármely $\alpha \in \mathbb{R}$ esetén önadjungált és sajátértékei

$$p = \hbar\alpha + 2\pi\hbar m \quad (m \in \mathbb{Z}) . \quad (1.42)$$

1.8. Feladat Az egyszerűség kedvéért vegyük az 1.7. feladat b) részének $\alpha = 0$ esetét. Ekkor P_0 sajátértékei és normált sajátfüggvényei

$$p_m = 2\pi\hbar m \quad (m \in \mathbb{Z}) \quad (1.43)$$

valamint

$$\psi_m(x) = \exp(i2\pi mx) . \quad (1.44)$$

Mivel $[P_0, Q] = \frac{\hbar}{i}$, a következő ellentmondásra lehet jutni:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} &= \langle \psi_m \mid [P_0, Q] \mid \psi_m \rangle = \langle \psi_m \mid P_0 Q \mid \psi_m \rangle - \langle \psi_m \mid Q P_0 \mid \psi_m \rangle \\ &= \langle P_0^\dagger \psi_m \mid Q \psi_m \rangle - 2\pi\hbar m \langle \psi_m \mid Q \psi_m \rangle \\ &= (2\pi\hbar m - 2\pi\hbar m) \langle \psi_m \mid Q \psi_m \rangle = 0 . \end{aligned} \quad (1.45)$$

Hol a hiba a fenti okoskodásban?

1.2.2. Megoldások

1.1 Megoldás Írjuk fel a kommutátor definícióját:

$$[A, BC] = ABC - BCA = ABC - BAC + BAC - BCA = [A, B]C + B[A, C] \quad (1.46)$$

1.2 Megoldás Vezessük be a következő operátor függvényt:

$$F(s) = e^{sL} A e^{-sL}, \quad s \in \mathbb{C} .$$

Fejtsük sorba az $F(s)$ függvényt $s = 0$ körül:

$$F(s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d^n F}{ds^n} \Big|_{s=0} \frac{s^n}{n!}$$

Határozzuk meg az $F(s)$ függvény deriváltjait:

$$\begin{aligned} \frac{dF}{ds} &= e^{sL} L A e^{-sL} - e^{sL} A L e^{-sL} = e^{sL} [L, A] e^{-sL}, \\ \frac{d^2 F}{ds^2} &= e^{sL} L [L, A] e^{-sL} - e^{sL} [L, A] L e^{-sL} = e^{sL} [L, [L, A]] e^{-sL}, \text{ stb.} \end{aligned}$$

A deriváltakat a sorfejtésbe helyettesítve $s = 1$ esetén visszkapjuk az igazolandó azonosságot.

1.3 Megoldás Vezessük be a következő operátor függvényt:

$$T(s) = e^{sA} e^{sB} . \quad (1.47)$$

Határozzuk meg a fenti függvény s változó szerinti deriváltját:

$$\frac{dT}{ds} = Ae^{sA} e^{sB} + e^{sA} B e^{sB} = Ae^{sA} e^{sB} + e^{sA} B e^{-sA} e^{sA} e^{sB} = (A + e^{sA} B e^{-sA}) T(s) \quad (1.48)$$

Az előző kifejezésben használjuk a Hausdorff kifejtést:

$$e^{sA} B e^{-sA} = B + [A, B]s + \frac{1}{2}s^2[A[A, B]] + \dots = B + [A, B]s , \quad (1.49)$$

hiszen a megadott feltételek miatt a kifejtésnek csak az első két tagja különbözik nullától. Visszahelyettesítve a kifejtést $T(s)$ deriváltjába a következő közönséges differenciálegyenletet kapjuk:

$$\frac{dT}{ds} = (A + B + [A, B]s) T(s) \quad (1.50)$$

A fenti differenciálegyenletnek a megoldása a $T(0) = 1$ kezdőfeltétellel:

$$T(s) = e^{(A+B)s + \frac{1}{2}[A,B]s^2} . \quad (1.51)$$

Felhasználva, hogy $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$, $s = 1$ esetén visszakapjuk a bizonyítandó azonosságot:

$$e^A e^B = e^{A+B + \frac{1}{2}[A,B]} = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A,B]} \Rightarrow e^{A+B} = e^{-\frac{1}{2}[A,B]} e^A e^B . \quad (1.52)$$

1.4 Megoldás Amennyiben a Hilbert-téren (\mathcal{H}) ható lineáris operátorokra értelmezett a nyom művelet,

$$A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad \text{Tr}(A) = \sum_n \langle \psi_n | A | \psi_n \rangle < \infty , \quad (1.53)$$

Mivel az identitásra végtelen dimenzióban $\sum_n \langle \psi_n | I | \psi_n \rangle = \infty$, maga a nyomképzés operátora nem értelmes, így a látszólagos ellentmondás feloldódik. Világos, hogy véges dimenzióban fennálna az ellentmondás, így nem lehetne az alapvető elvekből levezetett Heisenberg-féle felcserélési összefüggésekkel konzisztens módon felépíteni a kvantummechanikát. Muszáj tehát végtelen dimenziós terekben dolgoznunk.

1.5 Megoldás Mivel $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$, a $P = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ operátor maximális értelmezési tartománya

$$D_{\max}(P) = \{ \psi \in L^2(\mathbb{R}) \mid \psi' \in L^2(\mathbb{R}) \} . \quad (1.54)$$

Az f függvény deriváltja

$$f'(x) = \sum_{n=2}^{\infty} f'_n(x) , \quad (1.55)$$

ahol

$$f'_n(x) = \begin{cases} n^2 & \text{ha } n - \frac{1}{n^2} < x < n \\ -n^2 & \text{ha } n \leq x \leq n + \frac{1}{n^2} \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases} , \quad (1.56)$$

melyre

$$\int_{-\infty}^{\infty} f'_n(x)^2 dx = 2n^4 \int_0^{\frac{1}{n^2}} dx = 2n^2, \quad (1.57)$$

tehát $\int_{-\infty}^{\infty} f'^2(x) dx = \infty$, azaz az $f \notin D_{\max}(P)$.

1.6 Megoldás Egyrészt f nyilvánvalóan folytonos $x = 0$ -ban, másrészt

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)^2 dx = \int_0^{\infty} x^{-3} \exp\left(-\frac{1}{2x^2}\right) dx = \left[\exp\left(-\frac{1}{2x^2}\right)\right]_0^{\infty} = 1, \quad (1.58)$$

tehát f egyúttal normált is. Továbbá $x > 0$ esetén

$$\begin{aligned} PQ^3 f(x) &= \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{d}{dx} \left(x^{3/2} \exp\left(-\frac{1}{4x^2}\right) \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{1}{2\sqrt{2}} (3x^2 + 1) x^{-3/2} \exp\left(-\frac{1}{4x^2}\right), \end{aligned} \quad (1.59)$$

valamint

$$\begin{aligned} Q^3 P f(x) &= x^3 \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{d}{dx} \left(x^{-3/2} \exp\left(-\frac{1}{4x^2}\right) \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{1}{2\sqrt{2}} (-3x^2 + 1) x^{-3/2} \exp\left(-\frac{1}{4x^2}\right), \end{aligned} \quad (1.60)$$

tehát

$$A f(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\sqrt{2}} x^{-3/2} \exp\left(-\frac{1}{4x^2}\right) = \frac{\hbar}{i} f(x) \quad (1.61)$$

és $x < 0$ esetén kihasználva, hogy $\frac{d|x|}{dx} = -1$

$$\begin{aligned} PQ^3 f(x) &= -\frac{\hbar}{i} \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{d}{dx} \left(|x|^{3/2} \exp\left(-\frac{1}{4|x|^2}\right) \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{1}{2\sqrt{2}} (3|x|^2 + 1) |x|^{-3/2} \exp\left(-\frac{1}{4|x|^2}\right), \end{aligned} \quad (1.62)$$

valamint

$$\begin{aligned} Q^3 P f(x) &= x^3 \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{d}{dx} \left(|x|^{-3/2} \exp\left(-\frac{1}{4|x|^2}\right) \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{1}{2\sqrt{2}} (-3|x|^2 + 1) |x|^{-3/2} \exp\left(-\frac{1}{4|x|^2}\right), \end{aligned} \quad (1.63)$$

tehát

$$A f(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\sqrt{2}} |x|^{-3/2} \exp\left(-\frac{1}{4|x|^2}\right) = \frac{\hbar}{i} f(x). \quad (1.64)$$

Az A operátor értelmezési tartományába csak olyan függvények tartozhatnak, melyekre

$$Q^3\psi \in D_{\max}(P) \text{ és } P\psi \in D_{\max}(Q^3) , \quad (1.65)$$

ahol

$$D_{\max}(Q^3) = \{ \psi \in L^2(\mathbb{R}) \mid Q^3\psi \in L^2(\mathbb{R}) \} . \quad (1.66)$$

A Q^3f függvény viszont eleve nem négyzetesen integrálható, így $f \notin D(A)$, ezért $\frac{\hbar}{i}$ nem sajátértéke A -nak.

Belátható viszont, hogy $\frac{\hbar}{i}$ sajátértéke A^\dagger -nak. Ugyanis

$$D(A^\dagger) = \{ \varphi \in L^2(\mathbb{R}) \mid \exists \tilde{\varphi} \in L^2(\mathbb{R}), \text{ hogy } \langle \varphi \mid A\psi \rangle = \langle \tilde{\varphi} \mid \psi \rangle \quad \forall \psi \in D(A) \} \quad (1.67)$$

és ekkor

$$A^\dagger\varphi = \tilde{\varphi} . \quad (1.68)$$

A fentiekből következik, hogy $f \in D(A^\dagger)$, vagyis A szimmetrikus, de nem önadjungált operátor. Látható, hogy ekkor lehetséges, hogy A -nak és A^\dagger -nak nem azonosak a sajátértékei, illetve lehetnek komplexek a sajátértékek. Többek között ezért is muszáj kirónunk a 2.1.1 fejezet elején a II. axiómában a dinamikai mennyiségeket reprezentáló operátorokra az önadjungáltságot.

1.7 Megoldás a) Könnyen látható, hogy

$$D(P_{[0,1]}^\dagger) = \{ \varphi \in L^2([0,1]) \mid \varphi' \in L^2([0,1]) \} , \quad (1.69)$$

mivel $\psi \in D(P_{[0,1]})$ és $\varphi \in D(P_{[0,1]}^\dagger)$ esetén

$$\int_0^1 \varphi(x)^* \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi(x)}{dx} dx = \int_0^1 \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d\varphi(x)}{dx} \right)^* \psi(x) dx + \underbrace{\frac{\hbar}{i} [\varphi(x)^* \psi(x)]_0^1}_{=0} . \quad (1.70)$$

Tehát a $D(P_{[0,1]})$ halmazon értelmezett $P_{[0,1]}$ operátor szimmetrikus, de nem önadjungált:

$$P_{[0,1]} \subset P_{[0,1]}^\dagger . \quad (1.71)$$

A

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d\psi_p(x)}{dx} = p\psi_p(x) \quad (p \in \mathbb{C}) \quad (1.72)$$

egyenlet megoldása

$$\psi_p(x) = c_p \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) \quad c_p \in \mathbb{C} \setminus \{0\} , \quad (1.73)$$

amiből rögtön következik, hogy mivel ψ_p nem tudja a peremfeltételeket, $\psi_p \notin D(P_{[0,1]})$, viszont $\psi_p \in D(P_{[0,1]}^\dagger) \quad \forall p \in \mathbb{C}$ teljesül.

b) Valamely $\alpha \in \mathbb{R}$ esetén a

$$D(P_\alpha) = \{\psi \in L^2([0, 1]) \mid \psi' \in L^2([0, 1]) \text{ és } \psi(1) = e^{i\alpha}\psi(0)\} \quad (1.74)$$

értelmezési tartományon értelmezett P_α operátor azonban már önadjungált. A kiintegrált rész ugyanis csak akkor tűnik el, ha $\varphi \in D(P_\alpha)$, következésképpen $D(P_\alpha^\dagger) = D(P_\alpha)$. Másrészt

$$\psi(1) = c_p \exp\left(\frac{i}{\hbar}p\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}p\right) \psi(0) \longrightarrow \alpha = p/\hbar - 2\pi m \quad (m \in \mathbb{Z}), \quad (1.75)$$

tehát P_α sajátértékei

$$p = \hbar\alpha + 2\pi\hbar m \quad (m \in \mathbb{Z}). \quad (1.76)$$

1.8 Megoldás Nyilvánvaló, hogy $D(Q) = L^2([0, 1])$ és $Q^\dagger = Q$. Következésképpen $\forall \psi \in D(P_0)$ esetén $P_0\psi \in D(Q)$, tehát a QP_0 operátor értelmezési tartománya $D(P_0)$. Azonban $\forall \psi \in D(P_0)$ esetén $Q\psi(0) = 0$ és $Q\psi(1) = \psi(1) \neq 0$, tehát $Q\psi \notin D(P_0)$. Ezért $\psi_m \notin D([P_0, Q])$, azaz a fenti levezetés értelmetlen.

2. fejezet

A kvantummechanika axiómái, egyszerű kvantummechanikai rendszerek

2.1. Elmélet

2.1.1. A kvantummechanika axiómái

A kvantummechanika axiómáit ún. tiszta állapotra mondjuk ki:

- I Egy részecske fizikai állapotát egy \mathcal{H} szeparábilis Hilbert-tér sugaraival jellemezzük. Sugár alatt a \mathcal{H} Hilbert-tér $|\Psi\rangle \sim |\Phi\rangle$, ha $|\Psi\rangle = c|\Phi\rangle$ ($c \in \mathbb{C}$) ekvivalencia reláció szerinti faktorterének elemeit értjük.

Kicsit pongyolábban foglalmazva azt is mondhatjuk, hogy az állapotot egy szeparábilis Hilbert-tér egységnyi abszolút értékű elemeivel ($\|\Psi\|^2 = 1$) reprezentáljuk, és a $|\Psi\rangle$ illetve $e^{i\varphi}|\Psi\rangle$ ugyan azt a fizikai állapotot írják le.

- II A dinamikai mennyiségeket (A) ezen a \mathcal{H} téren ható lineáris önantjungált operátorokkal (\hat{A}) reprezentáljuk. Dinamikai mennyiségnek a koordinátát, az impulzust, illetve az ezekkel kifejezhető mennyiségeket nevezzük. A reprezentációnak olyannak kell lennie, hogy (a klasszikus mechanikához hasonlóan) az impulzus a téreltolás, az impulzus momentum a forgatás, az energia pedig az időeltolás generátora legyen.
- III A $|\Psi\rangle$ fizikai állapotban az A dinamikai mennyiség mérésekor a mérési eredmény értéke (a) az \hat{A} operátor spektrumának egy részhalmaza: $a \in \sigma_{\hat{A}}$. Annak valószínűsége, hogy a az I intervallumba esik:

$$\mathbb{P}(a \in I) = \int_I \langle \Psi | d\hat{E}(\lambda) | \Psi \rangle \quad (2.1)$$

ahol $d\hat{E}(\lambda)$ az \hat{A} spektárlfelbontásában szereplő spektrálmérték: $\hat{A} = \int_{\sigma_{\hat{A}}} \lambda d\hat{E}(\lambda)$

Ha az \hat{A} operátornak csak pontspektruma van, akkor sajátfüggvényei ($|\varphi_\lambda\rangle$) ortonormált bázist alkotnak, így bármely $|\Psi\rangle$ vektor kifejezhető ezen a bázison.

$$|\Psi\rangle = \sum_{\lambda} c_{\lambda} |\varphi_{\lambda}\rangle \quad (2.2)$$

Annak valószínűsége, hogy az a mért értékünk μ -vel egyenlő, épp a μ -höz tartozó kifejezési együttható abszolútérték négyzete, ugyanis a (2.1) egyenletben szereplő $\int_{\lambda=\mu} d\hat{E}(\lambda)$ kifejezés a $|\varphi_{\mu}\rangle \langle\varphi_{\mu}|$ -val azonos:

$$\mathbb{P}(a = \mu) = \langle\Psi| \varphi_{\mu}\rangle \langle\varphi_{\mu}| \Psi\rangle = |c_{\mu}|^2 = |c_a|^2 \quad (2.3)$$

A fentiekből és a III. axiómából következik tehát, hogy az A fizikai mennyiség várható értéke:

$$\langle A \rangle = \sum_a \mathbb{P}(\lambda = a = \mu) \cdot a = \sum_a |c_a|^2 \cdot a = \langle\Psi| \hat{A} |\Psi\rangle \quad (2.4)$$

Rövid gondolkodás után látható, hogy ez utóbbi eredmény igaz folytonos spektrum esetén is.

IV Pont spektrum esetén: Az A dinamikai mennyiség mérése során a mérés előtti $|\Psi\rangle$ állapot beugrik az \hat{A} operátor a mért értékéhez tartozó sajátfüggvénybe

$$a = \mu \\ |\Psi\rangle \rightarrow |\varphi_{\mu}\rangle = |\varphi_a\rangle$$

Folytonos spektrum esetén (az előző általánosítása): Ha az A dinamikai mennyiség mérése során az I intervallumot kapjuk mérési eredményül, akkor a mérés előtti $|\Psi\rangle$ állapot rávetül az \hat{A} operátor I -hez tartozó sajátalterére:

$$a \in I \\ |\Psi\rangle \rightarrow \frac{\hat{P}_I |\Psi\rangle}{\|\hat{P}_I |\Psi\rangle\|},$$

ahol \hat{P}_I az I intervallumhoz tartozó sajátalterre vetítés operátora:

$$\hat{P}_I = \int_{\lambda \in I} d\hat{E}(\lambda) \quad (2.5)$$

Ez az axióma tehát azt a tényt fejezi ki, hogy maga a mérés hatással van a mért rendszerre, mely a mérés után már nem lehet ugyanabban az állapotban, mint korábban. Míg klasszikus fizikában egy tárgy helyének mérésére használhatunk pl. lézeres távolságmérőt mely alig befolyásolja a makroszkópikus méretű tárgy állapotát, addig egy elektron helyének mérésére alkalmas detektor jelentősen nagyobb nagyságú, energiájú, stb... az elektronnál, így tehát maga mérés jelentősen kell, hogy befolyásolja a mérendő elektront.

2.1.2. Az axiómák és szimmetriák következményei

Ha egy rendszernek van egy szimmetriája, akkor az azt jelenti, hogy ha a rendszeren a szimmetriához kapcsolódó transzformációt végrehajtjuk, akkor a mérhető mennyiségek nem változhatnak meg. Tekintsük az \hat{A} operátorral reprezentált A mennyiséget $|\varphi_n\rangle$ sajátbázissal, és egy $|\Psi\rangle$ állapotot, melyek \hat{A}' , $|\varphi'_n\rangle$ és $|\Psi'\rangle$ -be mennek az a transzformáció hatására. \hat{A} és \hat{A}' ugyan azt a mérhető mennyiséget reprezentálják, így világos, hogy a szimmetria transzformáció előtt és után spektrumuk azonos kell legyen, hiszen a mérések eredménye a spektrum egy-egy része:

$$\hat{A} |\varphi_n\rangle = a_n |\varphi_n\rangle \quad (2.6)$$

$$\hat{A}' |\varphi'_n\rangle = a_n |\varphi'_n\rangle \quad (2.7)$$

Emellett a mérhető a_n értékekhez tartozó mérési valószínűségek is kimérhetőek azonos rendszereken végzett mérések sokaságával, így ezek is meg kell, hogy egyezzenek. Ezért a

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle \quad (2.8)$$

$$|\Psi'\rangle = \sum_n c'_n |\varphi'_n\rangle \quad (2.9)$$

kifejtésben $|c_n|^2 = |c'_n|^2$ egyenletnek kell teljesülnie. Ez azt jelenti, hogy $|\langle\Psi|\varphi_n\rangle| = |\langle\Psi'|\varphi'_n\rangle| \forall n$, vagyis a transzformációnak unitérnek vagy antiunitérnek kell lennie. Nekünk most elegendő lesz csak az unitér eset, részletesebb leírás megtalálható Ballentine könyvében [5].

$$|\Psi'\rangle = \hat{U} |\Psi\rangle \quad (2.10)$$

$$\hat{A}' = \hat{U} \hat{A} \hat{U}^{-1} \quad (2.11)$$

Legyen tehát a szimmetria transzformációhoz tartozó operátor $\hat{U}(s)$, ami függjön az s folytonos paramétertől, és válasszuk s -t olyannak, hogy $\hat{U}(0) = \hat{I}$ teljesüljön. Ekkor $\hat{U}(s)$ felírható az infinitezimális generátorával:

$$\hat{U}(s) = e^{i\hat{K}s}, \quad (2.12)$$

ahol a \hat{K} infinitezimális generátor egy önadjungált operátor. \hat{K} -t azért hívják infinitezimális generátornak, mert

$$\left. \frac{d\hat{U}(s)}{ds} \right|_{s=0} = i\hat{K} \quad (2.13)$$

Klasszikus mechanikából tudjuk, hogy az impulzus i -edik komponense az i -edik koordináta irányában való eltolás, $\mathbf{L} \cdot \mathbf{e}_n$ az \mathbf{e}_n irányú tengely körüli forgatás, a Hamilton-függvény pedig az időeltolás generátora (Lásd: Keszthelyi Tamás: Mechanika, Infinitezimális kanonikus transzformációk fejezete). Az előbb felsorolatak az adott fizikai mennyiségek szerves tulajdonságai, ezért szeretnénk, ha a kvantummechanikában is érvényben maradnának, így a II. axiómán keresztül az axiómák közé soroljuk őket.

Nézzük meg, hogy ennek milyen következményei vannak a mennyiségeket reprezentáló operátorokra nézve! Az impulzus i -edik komponense az i -edik koordináta irányába való téreltolás generátora. Ha a teret eltoljuk az i -edik irányba s -sel, akkor az új \hat{x}'_i koordináta operátor már nem x_i -t, hanem $x_i - s$ -t méri. Ezen kívül \hat{p}_i nem lehet a (2.12) egyenletben szereplő K , hiszen akkor az exponenciális függvény hasában nem egy dimenziótlan mennyiség lenne. Hogy dimenziótlanítsunk, osszunk le egy Js dimenziójú konstanssal, melyet \hbar -sal (hívonással) jelölünk:

$$\hat{x}'_i = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}_i s} \hat{x}_i e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}_i s} = \widehat{x_i - s} = \hat{x}_i - s\hat{I} \quad (2.14)$$

Fejtsük sorba a (2.14) egyenletet kis s esetére első rendig:

$$\hat{x}_i - s\hat{I} = \left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar}\hat{p}_i s\right) \hat{x}_i \left(\hat{I} + \frac{i}{\hbar}\hat{p}_i s\right) + \mathcal{O}(s^2) = \hat{x}_i - s\frac{i}{\hbar}(\hat{p}_i \hat{x}_i - \hat{x}_i \hat{p}_i) + \mathcal{O}(s^2) \quad (2.15)$$

Bevezetve az ún. kommutátort, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, $s \rightarrow 0$ limeszben a két oldal egyenlőségéből azt kapjuk, hogy:

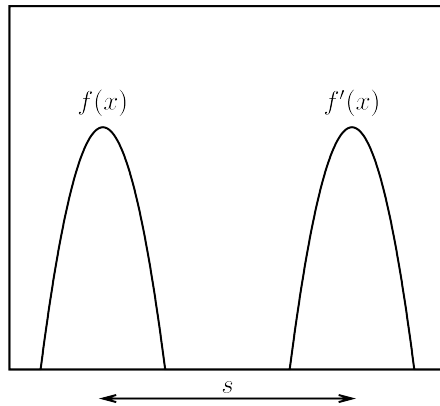
$$[\hat{p}_i, \hat{x}_i] = \frac{\hbar}{i}\hat{I} \quad (2.16)$$

A különböző irányú koordináták és impulzusok nincsenek egymással szimmetria transzformációkon keresztül összecsatolva, ezért ezek kommutátora 0. Mindezeket összeszedve megkapjuk a Heisenberg-féle kommutációs (felcserélési) relációkat:

$$\begin{aligned} [\hat{p}_i, \hat{x}_j] &= \frac{\hbar}{i}\delta_{ij}\hat{I} \\ [\hat{x}_i, \hat{x}_j] &= 0 \\ [\hat{p}_i, \hat{p}_j] &= 0 \end{aligned}$$

A 2.2 megoldásban megmutatjuk, hogy a klasszikus mechanikai $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ definícióba operátorokat írva, $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$, $\hat{\mathbf{L}}$ épp a forgatások infinitezimális generátora lesz. Itt $\hat{\mathbf{r}}$ az $\hat{\mathbf{r}} = (\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3)$ operátorokból álló hármast jelöli.

Nézzük meg most mi történik, ha egy $f(x)$ függvényt eltolunk az x tengely mentén s -sel!



Bevezetve $x' = x + s$ -et világos, hogy $f'(x') = f(x)$. Ehhez hasonlóan, figyelembevéve még hogy a Hamilton-operátor az időeltolás infinitezimális generátora, a következőt kapjuk:

$$|\Psi'(t + s)\rangle = |\Psi(t)\rangle \quad (2.17)$$

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}s} |\Psi(t + s)\rangle = |\Psi(t)\rangle \quad (2.18)$$

Itt a \hbar -t szintén dimenzióatlanításra használjuk. Az előző egyenletet sorbafejtve s -ben

$$\left(\hat{I} + \frac{i}{\hbar}\hat{H}s + \mathcal{O}(s^2)\right) |\Psi(t + s)\rangle = |\Psi(t)\rangle \quad (2.19)$$

Átrendezve és $s \rightarrow 0$ határátmenetet véve megkapjuk az állapotok időfejlődését vezérlő egyenletet, az időfüggő Schrödinger egyenletet:

$$i\hbar\partial_t |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle \quad (2.20)$$

A Heisenberg-féle kommutációs relációkban és a Schrödinger-egyenletben is szükség van egy J s mértékegységű konstansra dimenzionális okokból. Azonban nem egyértelmű, hogy ugyanaz a \hbar konstans jelenik meg a két összefüggésben, vagy esetleg ezek egymás számszorosai. A mérésekkel akkor kapunk összevágó eredményeket, ha mindkét helyen ugyan az a $\hbar \approx 1.05457148 \cdot 10^{-34} Js$ értékű szám szerepel. A \hbar a kvantummechanika alapvető állandója, hasonlóan ahogyan a c fénysebesség az elektrodinamikában, vagy a k_B Boltzmann állandó a termodinamikában.

2.1.3. Egyszerű kvantummechanikai rendszerek

A következőekben a legegyszerűbb kvantummechanikai rendszerekkel ismerkedünk meg, melyek valamilyen egydimenziós potenciálban mozgó részecskét írnak le, a Hilbert-térnek legtöbbször választható ez esetben az $L^2(\mathbb{R})$. Mivelhogy az idő nem dinamikai mennyiség, a kvantummechanikában nem rendelünk hozzá operátort, csak egy paraméter. A $|\Psi(t)\rangle$ állapotot minden időpillanatban egy $L^2(\mathbb{R})$ -beli függvény reprezentálja. A klasszikus elméleti mechanikában a fizikai rendszert a Hamilton-függvényével definiáljuk. Kvantummechanikában ehhez hasonlóan járunk el, a rendszert a Hamilton operátorral definiáljuk. (Vigyázzunk! A klasszikus Hamilton-függvény és egy kvantummechanikai Hamilton-operátor között nincs egy-egy értelmű megfeleltetés! Klasszikusan ugyanis pl. $H(q, p) = p \cdot q = H'(q, p) = q \cdot p$, míg kvantummechanikában a Heisenberg-féle felcserélési relációk miatt $\hat{q} \cdot \hat{p} \neq \hat{p} \cdot \hat{q}$!) A Hamilton-operátor tehát $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ alakú. Egy lehetséges választás a Heisenberg-féle felcserélési relációk kielégítésére, ha \hat{x} -nek az x -koordinátával való szorzás operátorát, \hat{p} -nek pedig a $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ differenciáloperátort választjuk, ugyanis:

$$[\hat{p}, \hat{x}] \Psi(x, t) = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x} (x\Psi(x, t)) - x \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \right) = \frac{\hbar}{i} \Psi(x, t), \quad (2.21)$$

ahol tehát $\Psi(x, t)$ alatt azt értjük, hogy $\Psi(x, t)$ egy x szerint négyzetesen integrálható függvény bármely t értékre. Az \hat{x} és \hat{p} operátorra vonatkozó fenti választást koordináta reprezentációnak hívjuk. Vegyük észre, hogy ezek (egy \hbar konstanstól eltekintve) épp az

1.10. példában bevezetett szorzás és deriválás operátorok. A hely várható értéke a (2.4) egyenlet és az $L^2(\mathbb{R})$ szokásos skalárszorzata alapján:

$$\langle \Psi | \hat{x} | \Psi \rangle = \int \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx = \int x |\Psi(x, t)|^2 dx. \quad (2.22)$$

Vagyis $|\Psi(x, t)|^2$ a részecske x tengely mentén való megtalálási valószínűségének szokásos valószínűségelméleti sűrűségfüggvénye. Mivel az állapotot a $|\Psi\rangle$ állapotfüggvénnyel írjuk le, abban benne van minden információ amit elvileg tudhatunk a rendszerről. Ez azonban nem tartalmazza azt az információt, hogy pontosan hol van a részecskénk, csak annyit, hogy hol milyen valószínűséggel található meg! A tökéletesen meghatározott helyű részecske „sűrűségfüggvénye” egy Dirac-delta lenne, vagyis az állapota éppen a szorzásoperátor (1.7) képletben szereplő $|\lambda\rangle = f_{\lambda, n}(x) = \sqrt{n} \cdot \mathbb{1}_{\lambda, \frac{1}{n}}$ approximatív sajátvektora. Minthogy a szorzás operátornak nincs sajátfüggvénye, csak approximatív sajátfüggvénye, tökéletesen meghatározott helyű (hely sajátállapotban lévő) részecske sincs. Az első axióma kitétele, az állapotfüggvény normáltsága ($\int |\Psi(x)|^2 dx = 1$) biztosítja, hogy tényleg valószínűségről legyen szó. Szintén az első axiómában szerepel, hogy $|\Psi\rangle$ és $e^{i\varphi} |\Psi\rangle$ ugyanazt az állapotot írják le, ami szintén összevág azzal, hogy $|\Psi(x)|^2$ hordoz fizikailag mérhető információt, melyből kiesik az $e^{i\varphi}$ globális fázisfaktor.

Koordináta reprezentációban, egydimenziós potenciálban mozgó részecske Hamilton-operátora tehát a $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ alakot ölti, a Schrödinger-egyenlet pedig egy parciális differenciálegyenlet, melyek megoldásánál gyakran alkalmazható módszer a változók szétválasztása. Tegyük fel tehát, hogy $\Psi(x, t) = \psi(x)\vartheta(t)$ alakban írható. Ekkor a Schrödinger egyenlet a következőképp néz ki:

$$\begin{aligned} i\hbar\psi(x)\partial_t\vartheta(t) &= \vartheta(t) \cdot \hat{H}\psi(x) \\ i\hbar\frac{1}{\vartheta(t)}\partial_t\vartheta(t) &= \frac{1}{\psi(x)}\hat{H}\psi(x) = E \end{aligned}$$

A második egyenletnek bármely x -re és t -re teljesülnie kell, és minthogy ezen paraméterek függetlenek, mindkét oldalnak egy E konstanssal kell egyenlőnek lennie. A fenti egyenletet rendezve, és az időre vonatkozó differenciálegyenletet megoldva kapjuk, hogy:

$$i\hbar\partial_t\vartheta(t) = E\vartheta(t) \Rightarrow \vartheta(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad (2.23)$$

Vagyis ez esetben az időfüggés csak egy egyszerű fázisfaktort ad az állapotnak. Ha pedig a $\psi(x)$ -re vonatkozó részt vizsgáljuk, akkor azt kapjuk, hogy $\psi(x)$ -nek a Hamilton-operátor sajátfüggvényének kell lennie, amit stacionárius, vagy időfüggetlen Schrödinger-egyenletnek nevezünk:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.24)$$

Konkréten erre az esetre vonatkozó Hamilton operátort beírva:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.25)$$

Látható, hogy a korábban bevezetett E konstans a Hamilton-operátor sajátértéke, vagyis joggal nevezhetjük ezt az energiának. Az is világos, hogy a változók szétválasztása akkor tehető meg, ha az állapotfüggvény térbeli része, $\psi(x)$, a Hamilton-operátor sajátfüggvénye. Ekkor az időfüggés egy egyszerű $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ fázisfaktort ad csak az állapothoz, vagyis a $|\psi(x)|^2$ megtalálási valószínűség időben állandó.

2.1.4. A lineáris harmonikus oszcillátor

Az egydimenziós harmonikus oszcillátor Hamilton függvénye

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2, \quad (2.26)$$

ahol m a részecske tömege és ω a rezgés saját-körfrekvenciája. A *kvantummechanikai* tárgyalás szerint a

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (2.27)$$

sajátérték problémát kell megoldanunk, ahol koordináta reprezentációban,

$$H(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2. \quad (2.28)$$

Bevezetve a

$$q = \frac{x}{x_0} \rightarrow \frac{d^2}{dx^2} = \frac{1}{x_0^2} \frac{d^2}{dq^2},$$

változó transzformációt, a Hamilton operátort

$$H(q) = -\frac{\hbar^2}{2mx_0^2} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{m\omega^2 x_0^2}{2} q^2, \quad (2.29)$$

alakban írhatjuk. Célszerű az x_0 paramétert úgy megválasztani, hogy a fenti kifejezésben a $\frac{d^2}{dq^2}$ és a q^2 tagok együtthatói, az előjeltől eltekintve, megegyezzenek, azaz,

$$\frac{\hbar^2}{2mx_0^2} = \frac{m\omega^2 x_0^2}{2} \Rightarrow x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (2.30)$$

↓

$$H(q) = \frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{d^2}{dq^2} + q^2 \right), \quad (2.31)$$

és a Schrödinger egyenletet

$$\left(-\frac{d^2}{dq^2} + q^2 \right) \psi(q) = \eta \psi(q), \quad (2.32)$$

formában írhatjuk, ahol

$$\eta = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (2.33)$$

az energia helyett bevezetett dimenziótlan változó.

Megoldás Sommerfeld polinom módszerrel

Írjuk át a (2.32) sajátérték egyenletet,

$$\frac{d^2\psi(q)}{dq^2} + (\eta - q^2) \psi(q) = 0, \quad (2.34)$$

melynek először a $q \rightarrow \pm\infty$ határesetben vett, ún. aszimptotikus megoldását keressük:

$$\frac{d^2\psi_a(q)}{dq^2} - q^2\psi_a(q) = 0. \quad (2.35)$$

Felhasználva az alábbi azonosságokat ill. aszimptotikus közelítést,

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dq} - q\right) \left(\frac{d}{dq} + q\right) &= \frac{d^2}{dq^2} + \frac{d}{dq}q - q\frac{d}{dq} - q^2 \\ &= \frac{d^2}{dq^2} - q^2 + 1 \xrightarrow{q \rightarrow \pm\infty} \frac{d^2}{dq^2} - q^2, \end{aligned}$$

belátható, hogy a

$$\left(\frac{d}{dq} + q\right) \psi_a(q) = 0 \quad \longrightarrow \quad \psi_a(q) = e^{-q^2/2} \quad (2.36)$$

a keresett reguláris aszimptotikus megoldás.

A következő lépésben az általános megoldást az aszimptotikus megoldás és egy ismeretlen $u(q)$ függvény szorzataként keressük:

$$\psi(q) = u(q) \psi_a(q) = u(q) e^{-q^2/2}, \quad (2.37)$$

amit behelyettesítve a (2.34) egyenletbe,

$$\frac{d^2 \left(u(q) e^{-q^2/2} \right)}{dq^2} + (\eta - q^2) u(q) e^{-q^2/2} = 0, \quad (2.38)$$

és elvégezve a megfelelő deriválásokat, a

$$\frac{d^2 u(q)}{dq^2} - 2q \frac{du(q)}{dq} + (\eta - 1)u(q) = 0, \quad (2.39)$$

nevezetes differenciálegyenletet nyerjük. A továbbiakban feltételezzük, hogy az u függvény analitikus:

$$u(q) = \sum_{r=0}^{\infty} c_r q^r, \quad (2.40)$$

$$\frac{du(q)}{dq} = \sum_{r=1}^{\infty} r c_r q^{r-1} \quad \longrightarrow \quad 2q \frac{du(q)}{dq} = \sum_{r=0}^{\infty} 2r c_r q^r, \quad (2.41)$$

$$\frac{d^2 u(q)}{dq^2} = \sum_{r=2}^{\infty} r(r-1) c_r q^{r-2} = \sum_{r=0}^{\infty} (r+1)(r+2) c_{r+2} q^r. \quad (2.42)$$

A fenti kifejezéseket visszahelyettesítve a (2.39) egyenletbe a

$$\sum_{r=0}^{\infty} \{ (r+1)(r+2) c_{r+2} - 2r c_r + (\eta - 1) c_r \} q^r = 0 \quad (2.43)$$

egyenletet kapjuk, melyből a

$$c_{r+2} = \frac{2r+1-\eta}{(r+1)(r+2)} c_r \quad (2.44)$$

rekurziós összefüggés adódik ($r = 0, 1, 2, \dots$). Vegyük észre, hogy az $u(q)$ függvény hatványsorában az r -ik tag együtthatója az $r+2$ -ik tag együtthatóját határozza meg, így a másodrendű differenciálegyenlet két független megoldását generálhatjuk a következő választással,

$$\begin{aligned} c_0 = 1 \quad , \quad c_1 = 0 &\longrightarrow u \text{ páros függvény} \\ c_0 = 0 \quad , \quad c_1 = 1 &\longrightarrow u \text{ páratlan függvény} . \end{aligned}$$

Másrészt viszont $r \rightarrow \infty$ esetén a rekurziós összefüggés közelíthető a

$$c_{r+2} \sim \frac{2}{r} c_r \quad (2.45)$$

kifejezéssel, mely az e^{q^2} függvény hatványegyütthatóira jellemző rekurziós reláció:

$$e^{q^2} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{q^{2r}}{r!} = \sum_{r=0,2,\dots} \frac{q^r}{(r/2)!} \longrightarrow c_{r+2} = \frac{2}{r+2} c_r \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{2}{r} c_r .$$

Következésképpen könnyen belátható, hogy a megoldás tetszőleges pontossággal közelíti az

$$u(q) \sim f(q) + C e^{q^2} \quad (\text{páros}) \quad \text{vagy az} \quad u(q) \sim q \left(f(q) + C e^{q^2} \right) \quad (\text{páratlan}) \quad (2.46)$$

függvényt, ahol az $f(q)$ véges, páros polinomot és a C állandót a kívánt pontossághoz lehet beállítani. Ez viszont azt jelenti, hogy a $\psi(q) = u(q) e^{-q^2/2}$ megoldás aszimptotikusan $e^{q^2/2}$ szerint divergál, tehát általános esetben ψ normája divergál, így nem normálható. Ezt csak úgy tudjuk elkerülni, hogy a (2.44) rekurziós összefüggést valamely $r = n$ indexnél megállítjuk, azaz

$$\eta = 2n + 1 \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (2.47)$$

választással biztosítjuk, hogy

$$c_n \neq 0, \quad c_{n+2} = c_{n+4} = \dots = 0 \quad . \quad (2.48)$$

A η paraméter definíciójából következik, hogy a lehetséges sajátenergiák az

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (2.49)$$

értékeket vehetik föl. A sajátfüggvények:

$$\psi_n(q) = N_n H_n(q) e^{-q^2/2} , \quad (2.50)$$

ahol N_n normálási tényezők és $H_n(q)$ az ún. Hermite-polinomokat jelöli:

n	$H_n(q)$
0	1
1	$2q$
2	$4q^2 - 2$
3	$8q^3 - 12q$
\vdots	\vdots

A Hermite-polinomokra fennáll az alábbi ortogonalitási reláció,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-q^2} H_n(q) H_m(q) = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm} , \quad (2.51)$$

melyből a normálási tényezők meghatározhatók:

$$N_n = (2^n n! \sqrt{\pi} x_0)^{-1/2} . \quad (2.52)$$

Algebrai megoldás: keltő és eltüntető operátorok

Már korábban levezettük a

$$\left(\frac{d}{dq} - q \right) \left(\frac{d}{dq} + q \right) = \frac{d^2}{dq^2} - q^2 + 1 ,$$

összefüggést, mely segítségével a (2.31) Hamilton operátor átírható:

$$H(q) = \hbar\omega \left\{ \frac{1}{2} \left(q - \frac{d}{dq} \right) \left(q + \frac{d}{dq} \right) + \frac{1}{2} \right\} . \quad (2.53)$$

Célszerű bevezetni az

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(q + \frac{d}{dq} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}x_0} \left(x + x_0^2 \frac{d}{dx} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}x_0} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) \quad (2.54)$$

és

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(q - \frac{d}{dq} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}x_0} \left(x - x_0^2 \frac{d}{dx} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}x_0} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) \quad (2.55)$$

operátorokat ($x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$), melyekkel a Hamilton operátor

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) , \quad (2.56)$$

alakban írható. Megmutatjuk, hogy a harmonikus oszcillátor spektruma levezethető az \hat{a} és \hat{a}^\dagger operátorok algebrai (felcserélési) tulajdonságaiból, és nem szükséges valamely konkrét reprezentációt használnunk. Ehhez csupán az

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

felcserélési relációt kell felhasználnunk, melyből a (2.54) és (2.55) definíciók alapján következik:

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \frac{1}{2x_0^2} \left[\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p}, \hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right] \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left(-\frac{i}{m\omega} [\hat{x}, \hat{p}] + \frac{i}{m\omega} [\hat{p}, \hat{x}] \right) = 1 . \end{aligned} \quad (2.57)$$

A (2.56) kifejezésből következménye, hogy a Hamilton operátor spektrumának alsó korlátja $\hbar\omega/2$, hiszen normált $|\psi\rangle$ állapotokra:

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \hbar\omega \left(\langle \psi | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \psi \rangle + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\langle \hat{a}\psi | \hat{a}\psi \rangle + \frac{1}{2} \right) \geq \frac{\hbar\omega}{2} . \quad (2.58)$$

A továbbiakban alapvető jelentőségűek a következő felcserélési relációk:

$$[\hat{H}, \hat{a}] = \hbar\omega \left[\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}, \hat{a} \right] = \hbar\omega [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] \hat{a} = -\hbar\omega \hat{a} , \quad (2.59)$$

és

$$[\hat{H}, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega \left[\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}, \hat{a}^\dagger \right] = \hbar\omega \hat{a}^\dagger [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega \hat{a}^\dagger . \quad (2.60)$$

Legyen $|\psi\rangle$ \hat{H} egy sajátfüggvénye E sajátértékkel. Ekkor

$$\hat{H}\hat{a}|\psi\rangle = \hat{a}\hat{H}|\psi\rangle - \hbar\omega\hat{a}|\psi\rangle = (E - \hbar\omega)\hat{a}|\psi\rangle , \quad (2.61)$$

azaz $\hat{a}|\psi\rangle$ is sajátfüggvény $E - \hbar\omega$ sajátértékkel. Ezért hívjuk az \hat{a} operátort *lefelé léptető* vagy *eltüntető* operátornak. Mivel azonban H spektruma alulról korlátos, léteznie kell egy $|\psi_0\rangle$ sajátfüggvénynek, amit az \hat{a} operátor a Hilbert-tér null-elemébe ($|\rangle_0$) léptet,

$$\hat{a}|\psi_0\rangle = |\rangle_0 , \quad (2.62)$$

mely nem reprezentálhat fizikai állapotot. Következésképpen,

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}|\psi_0\rangle = |\rangle_0 \Rightarrow \hat{H}|\psi_0\rangle = \hbar\omega \left(|\rangle_0 + \frac{1}{2}|\psi_0\rangle \right) = \frac{\hbar\omega}{2}|\psi_0\rangle , \quad (2.63)$$

tehát $|\psi_0\rangle$ pontosan a minimális sajátértékhez tartozó sajátfüggvény.

A (2.61) egyenlethez hasonlóan beláthatjuk:

$$\hat{H}\hat{a}^\dagger|\psi\rangle = \hat{a}^\dagger\hat{H}|\psi\rangle + \hbar\omega\hat{a}^\dagger|\psi\rangle = (E + \hbar\omega)\hat{a}^\dagger|\psi\rangle , \quad (2.64)$$

azaz $\hat{a}^\dagger|\psi\rangle$ is sajátfüggvény $E + \hbar\omega$ sajátértékkel. Ezért az \hat{a}^\dagger operátort *felfelé léptető* vagy *keltő* operátornak hívjuk. A keltő operátor segítségével szukcesszíven felépíthetjük a Hamilton operátor összes sajátfüggvényét. Az n -ik lépésben kapott hullámfüggvény sajátenergiája értelemszerűen

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) . \quad (2.65)$$

Más sajátérték az (2.61) egyenlet következtében nem létezhet.

Jelöljük az \hat{a}^\dagger operátor n -ik alkalmazásával kapott normált sajátfüggvényt $|n\rangle$ -nel ($|\psi_0\rangle \equiv |0\rangle$):

$$|n\rangle = A_n (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle , \quad (2.66)$$

ahol A_n egy később meghatározandó normálási tényező. A (2.56) és (2.65) egyenletek összevetéséből azonnal következik, hogy

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle .$$

Ezért az $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ operátort szokás gerjesztési (vagy betöltési) szám operátornak nevezni. Ezután már könnyen meghatározható a léptetőoperátorok hatása a sajátfüggvényekre:

$$|n+1\rangle = c \hat{a}^\dagger |n\rangle \implies \langle n+1|n+1\rangle = |c|^2 \langle n|\hat{a} \hat{a}^\dagger|n\rangle = |c|^2 (\langle n|n\rangle + \langle n|\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle) = (n+1)|c|^2 = 1 \quad (2.67)$$

$$\implies c = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \implies \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad (2.68)$$

illetve

$$|n-1\rangle = c \hat{a} |n\rangle \implies c \langle n-1|\hat{a}|n\rangle = c \langle n|\hat{a}^\dagger|n-1\rangle = c \sqrt{n} = 1 \implies c = \frac{1}{\sqrt{n}} \quad (2.69)$$

$$\implies \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle. \quad (2.70)$$

A normált sajátfüggvényeket tehát a következő formában tudjuk felírni:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle. \quad (2.71)$$

A sajátfüggvények koordinátareprezentációban

Határozzuk meg először az ún. vákuumállapotot:

$$\hat{a}\psi_0(q) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{d\psi_0(q)}{dq} + q\psi_0(q) \right) = 0, \quad (2.72)$$

melynek megoldása

$$\psi_0(q) = c_0 \exp(-q^2/2). \quad (2.73)$$

A c_0 normálási konstans a következő integrál alapján számítjuk,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x)\psi_0(x)dx = c_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x/x_0)^2} dx = c_0^2 x_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-q^2} dq = c_0^2 \sqrt{\pi} x_0 = 1 \rightarrow c_0 = (\sqrt{\pi} x_0)^{-1/2}.$$

Felhasználva a (2.55) definíciót, a normált sajátfüggvények tehát a

$$\psi_n(x) = (2^n n! \sqrt{\pi} x_0)^{-1/2} \left(q - \frac{d}{dq} \right)^n e^{-q^2/2} \Big|_{q=x/x_0}, \quad (2.74)$$

módon állítható elő, mely ekvivalens a

$$\psi_n(x) = (2^n n! \sqrt{\pi} x_0)^{-1/2} H_n \left(\frac{x}{x_0} \right) e^{-(x/x_0)^2/2}, \quad (2.75)$$

alakkal, ahol

$$H_n(q) = e^{q^2/2} \left(q - \frac{d}{dq} \right)^n e^{-q^2/2}, \quad (2.76)$$

a már ismert Hermite polinomok.

2.2. Feladatok

2.2.1. Példák

2.1. Feladat Határozzuk meg az eltolás $\hat{T}(\vec{R})$ operátorát,

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \hat{T}(\mathbf{R})f(\mathbf{r}), \quad (2.77)$$

ahol f egy tetszőlegesen sokszor differenciálható függvény.

2.2. Feladat Konstruáljuk meg az $R(\varphi, \mathbf{n}) \in O(3)$ \mathbf{n} tengely körüli φ szögű forgatás $\hat{O}(\varphi, \mathbf{n})$ operátorát,

$$f(R^{-1}(\varphi, \mathbf{n})\mathbf{r}) = \hat{O}(\varphi, \mathbf{n})f(\mathbf{r}), \quad (2.78)$$

ahol f egy tetszőlegesen sokszor differenciálható függvény!

2.3. Feladat Bizonyítsa be, hogy az egydimenziós kötött állapotok nem lehetnek elfajultak!

Segítség: Alkalmazzon indirekt bizonyítást! Írja fel a Schrödinger egyenletet a két, azonos energiájú hullámfüggvényre, majd mindegyiket szorozza be balról a másik hullámfüggvénnyel! Az így nyert egyenleteket egymásból kivonva egy teljes derivált kifejezéshez jutunk, mely azonosan zérus. Felhasználva, hogy a megoldások $x = \pm\infty$ -ben zérushoz tartanak, most már könnyedén beláthatjuk, hogy a két hullámfüggvény csak egy konstans szorzófaktorban különbözhet egymástól.

2.4. Feladat Oldjuk meg az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet a végtelen mély potenciálgödör esetére!

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{ha } x < 0 \\ 0, & \text{ha } 0 < x < L \\ \infty, & \text{ha } x > L \end{cases} \quad (2.79)$$

2.5. Feladat Keressük meg a

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| \geq a \\ -V_0 & |x| < a \end{cases}$$

potenciálgödör ($a > 0$, $V_0 > 0$) kötött állapotait ($-V_0 < E < 0$)! Diskutáljuk a megoldások paritását valamint a végtelen mély gödör határesetet!

2.6. Feladat Egydimenziós Dirac-delta potenciál esetén milyen határfeltétel szabható ki a hullámfüggvény deriváltjára? Határozzuk meg egy vonzó Dirac-delta potenciál kötött állapotának energiáját!

2.7. Feladat Adjuk meg a $H = \frac{p^2}{2m} - K\delta(x - a) - K\delta(x + a)$ ($K > 0$) Hamiltonoperátor sajátállapotait és sajátenergiáit!

2.8. Feladat Adott a következő egydimenziós potenciál:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{ha } x < -a \\ -K \delta(x) & \text{ha } |x| \leq a \\ \infty & \text{ha } x > a \end{cases},$$

ahol $K > 0$. Grafikus megoldással adja meg a kialakuló energiaszinteket! Mi a feltétele annak, hogy létezzen $E = 0$ energiájú megoldás?

2.9. Feladat Határozzuk meg az alábbi Hamilton operátor kötött állapotait:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \gamma \delta(x - a) + V(x), \quad (2.80)$$

ahol $\gamma > 0$, $a > 0$ és

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{ha } x \leq 0 \\ 0 & \text{ha } x > 0 \end{cases} ! \quad (2.81)$$

2.10. Feladat Mi a feltétele annak, hogy a

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ -V_0 & 0 \leq x \leq a \\ 0 & a < x \end{cases} \quad (V_0 > 0, a > 0),$$

potenciálban létezzen legalább egy kötött állapot ($V_0 < E < 0$) ?

2.11. Feladat Tekintsünk egy merev falú egydimenziós potenciáldobozba zárt részecskét,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } |x| < a \quad (a > 0) \\ \infty & \text{egyébként} \end{cases}. \quad (2.82)$$

A Hilbert tér

$$\mathcal{H} = \{\psi \in L^2([-a, a]) \mid \psi(a) = \psi(-a) = 0\} \quad (2.83)$$

és a Hamilton operátor

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}. \quad (2.84)$$

Legyen a részecske állapotát egy adott pillanatban leíró normált hullámfüggvény, $\psi \in \mathcal{H}$:

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{15}}{4a^{5/2}} (a^2 - x^2). \quad (2.85)$$

Mivel

$$H^2 \psi(x) = \frac{\hbar^4}{4m^2} \frac{d^4 \psi(x)}{dx^4} = 0, \quad (2.86)$$

fennáll, hogy

$$\langle \psi \mid H^2 \mid \psi \rangle = 0. \quad (2.87)$$

A fenti átlagérték viszont kiszámítható a H sajátfüggvényei szerinti kifejtésen keresztül is:

$$H \varphi_n = E_n \varphi_n, \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} n^2, \quad \varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi n}{2a}(x+a)\right) \quad (n = 1, 2, \dots), \quad (2.88)$$

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n, \quad c_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle, \quad \langle \psi | H^2 | \psi \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n^2. \quad (2.89)$$

Mivel $E_n^2 > 0$ és $0 \leq |c_n|^2 < 1$, $\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1$, ez utóbbi kifejezés biztosan nagyobb zérusnál. Lássuk be, hogy

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n^2 = \frac{15\hbar^4}{24m^2a^2}. \quad (2.90)$$

Melyik a korrekt eredmény és honnan származik az ellentmondás?

2.12. Feladat Tekintsük a

$$H(\mathbf{r}; a) = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}; a)$$

Hamilton operátort, ahol a egy folytonos paraméter. A sajátenergiák és a normált sajátfüggvények természetesen ugyancsak az a paraméter függvényei:

$$H(\mathbf{r}; a)\psi(\mathbf{r}; a) = E(a)\psi(\mathbf{r}; a).$$

Bizonyítsa az ún. Hellmann-Feynman tételt:

$$\frac{dE(a)}{da} = \left\langle \psi(\cdot; a) \left| \frac{\partial V(\cdot; a)}{\partial a} \right| \psi(\cdot; a) \right\rangle$$

ahol bevezettük az $f(\cdot; a) : \mathbf{r} \rightarrow f(\mathbf{r}; a)$ függvényjelölést.

2.13. Feladat Adottak a $H = p^2/2m + V(x)$ Hamilton operátor sajátfüggvényei: $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ ($n \in \mathbb{N}$). A koordináta és impulzus operátor felcserélési relációján nyilvánvaló, hogy

$$\langle n | [x, p] | n \rangle = i\hbar.$$

A fenti összefüggésben $p = m\dot{x}$ behelyettesítéssel és a (3.52) képletben szereplő kvantummechanikai időderivált definíciójának alkalmazásával igazolja, hogy

$$\sum_i (E_i - E_n) |\langle n | x | i \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2m}.$$

Segítség: A levezetésnél használja fel a $\sum_m |m\rangle \langle m| = I$ teljességi összefüggést!

2.14. Feladat Kronig - Penney modell

Tekintsük a következő potenciált:

$$V(x) = -\gamma \sum_{j=-\infty}^{\infty} \delta(x - ja). \quad (2.91)$$

Határozzuk meg azokat az energia tartományokat (sávokat), ahol léteznek a modell sajátállapotai!

Segítség: A $i - 1$ -edik és i -edik Dirac-delta közötti tartományokban keressük a hullámfüggvényt $\Psi_i = A_i e^{\alpha x} + B_i e^{-\alpha x}$ alakban, ahol az i -edik Dirac-delta az a helyre volt koncentrálna, α pedig az energia értékétől függően tisztán valós vagy tisztán képzetes. A hullámfüggvényre kiróható peremfeltételekből fejezzük ki az A_{i+1} és B_{i+1} együtthatókat

$$\underline{T} \begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{pmatrix} \quad (2.92)$$

alakban. Ezt követően vizsgáljuk meg egy N deltából álló periodikus peremfeltételekkel rendező $\left(\underline{T}^N \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} \right)$ lánc \underline{T} transzfer mátrixának sajátértékeit!

2.15. Feladat Definiáljuk a

$$H_n(q) = e^{q^2/2} \left(q - \frac{d}{dq} \right)^n e^{-q^2/2}$$

függvényeket.

a) Igazoljuk a következő rekurziós összefüggéseket:

$$H'_n(q) = 2nH_{n-1}(q) \quad ,$$

$$2qH_n(q) = H_{n+1}(q) + 2nH_{n-1}(q) \quad ,$$

következésképpen

$$H'_n(q) = 2qH_n(q) - H_{n+1}(q) \quad .$$

b) A rekurziós relációk alapján lássuk be, hogy a fenti függvények a Hermite-féle polinomok, azaz

$$H''_n(q) - 2qH'_n(q) + 2nH_n(q) = 0 \quad .$$

Segítség: Először teljes indukcióval bizonyítsuk, hogy

$$\left[\frac{d}{dq}, \left(q - \frac{d}{dq} \right)^n \right] = \left[q, \left(q - \frac{d}{dq} \right)^n \right] = n \left(q - \frac{d}{dq} \right)^{n-1} \quad ,$$

ahol használjuk fel az 1.1 megoldásban bizonyított $[A; BC] = B[A; C] + [A; B]C$ azonosságot.

2.16. Feladat Adott a következő egydimenziós potenciál:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{ha } x < 0 \\ \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 & \text{ha } x \geq 0 \end{cases} \quad .$$

Határozza meg az \hat{x} operátor várhatóértékét a rendszer alapállapotában!

Segítség: Használjuk a harmonikus oszcillátor sajátfüggvényeit!

2.17. Feladat Egy háromdimenziós harmonikus oszcillátor potenciálja

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2}m\omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) \quad . \quad (2.93)$$

Oldjuk meg a Schrödinger egyenletet! Hányszoros degeneráltságúak lesznek az egyes energiaszintek?

2.18. Feladat Határozzuk meg a következő kétdimenziós harmonikus oszcillátor spektrumát!

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 (x^2 + \alpha xy + y^2) \quad (2.94)$$

2.19. Feladat Tekintsük a következő potenciált:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{ha } x < 0 \\ -\frac{C}{x}, & \text{ha } x > 0 \end{cases} \quad (2.95)$$

Világos, hogy $x < 0$ esetén minden hullámfüggvény értéke 0. Az $x > 0$ tartományban Sommerfeld polinom módszerrel határozza meg a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{C}{x}\psi(x) = E\psi(x)$$

Schrödinger egyenlet sajátenergiáit ($C > 0, x > 0, E < 0$)!

Segítség: A megoldást keresse $\psi(x) = \psi_a(x) \sum_{i=1}^{\infty} c_i x^{i+s}$ alakban, ahol $\psi_a(x)$ az aszimptotikus megoldás és s az ún. indiciális index.

2.20. Feladat Tekintsük a következő potenciált:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{ha } x < 0 \\ -\frac{d_1}{x} + \frac{d_2}{x^2}, & \text{ha } x > 0 \end{cases} \quad (2.96)$$

Világos, hogy $x < 0$ esetén minden hullámfüggvény értéke 0. Az $x > 0$ tartományban határozzuk meg Sommerfeld polinom módszerrel a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left(-\frac{d_1}{x} + \frac{d_2}{x^2} \right) \psi(x) = E\psi(x)$$

Schrödinger egyenlet E sajátenergiáit ($x > 0, d_1, d_2 > 0$)!

Segítség: Az aszimptotikus megoldás megkeresése után az u függvényt vegye fel

$$u_s(x) = \sum_{i=0}^{\infty} b_i x^{i+s}$$

alakban. Behelyettesítés után a legalacsonyabb rendű x -hatvány együtthatójából határozza meg s -t !)

2.21. Feladat A léptető operátorok segítségével lássuk be a

$$qH_n(q) = nH_{n-1}(q) + \frac{1}{2}H_{n+1}(q) \quad (2.97)$$

összefüggést, ahol $H_n(q)$ az n -edfokú Hermite polinom!

2.22. Feladat Lássuk be az oszcillátorra vonatkozó viriáltételt,

$$\langle T \rangle_n = \langle V \rangle_n = E_n/2 \quad ! \quad (2.98)$$

2.23. Feladat Lássuk be kétdimenziós harmonikus oszcillátorra, hogy az

$$A_{ij} = \frac{1}{2m}p_i p_j + \frac{1}{2}m\omega^2 x_i x_j \quad (2.99)$$

mátrixnak minden mátrixeleme megmaradó mennyiség!

2.24. Feladat Definiáljuk a $|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle$ állapotot úgy, hogy

$$a |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle \quad (\alpha \in \mathbb{C})$$

ahol $|n\rangle$ a lineáris harmonikus oszcillátor n -ik sajátállapota és a az eltüntető operátor. Ez a koherens állapotok egy definíciója.

- a) Határozza meg a c_n együtthatókat! Normálás után adja meg a hullámfüggvény alakját, majd írja fel úgy, mint egy exponenciális operátor értékű függvény hatása az alapállapotra, $|0\rangle$.
- b) A fenti állapotra $t = 0$ időpillanatban az időfejllesztő $e^{\frac{i}{\hbar}Ht}$ operátort hattanva lássa be, hogy $|\alpha, t\rangle$ továbbra is az a operátor sajátfüggvénye marad $\alpha(t) = \alpha e^{-i\omega t}$ sajátértékkel, ahol ω az oszcillátor frekvenciája! A sajátfüggvény emeletl felszed még egy időfüggő fázisfaktort is.
- c) Lássa be, hogy ebben az állapotban az energia várható értéke

$$\bar{E} = \hbar\omega \left(|\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right)$$

- d) Lássa be, hogy az $|\alpha\rangle$ koherens állapotban a koordináta és impulzus határozatlansága a lehető legkisebb,

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} .$$

- e) Határozzuk meg az $|\alpha, t\rangle$ koherens állapotot koordináta reprezentációban!

Segítség: Használjuk az a) rész eredményét, illetve az 1.3. feladatban szereplő Baker-Campbell-Hausdorff formulát!

- f) Mutassuk meg, hogy az a^\dagger felfelé léptető operátornak nem léteznek sajátállapotai a négyzetesen integrálható függvények terén!

2.2.2. Megoldások

2.1 Megoldás *Először vizsgáljuk meg a feladatot egydimenzióban. Fejtsük Taylor sorba az $f(x)$ függvényt x körül:*

$$f(x + X) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{X^j}{j!} \left. \frac{d^j f}{dx^j} \right|_x \quad (2.100)$$

Bevezethetünk egy új differenciál operátort:

$$\sum_{j=0}^{\infty} \frac{X^j}{j!} \left. \frac{d^j f}{dx^j} \right|_x = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{X^j}{j!} \frac{d^j}{dx^j} f(x) = e^{(X \frac{d}{dx})} f(x) \quad (2.101)$$

Felhasználva az impuzus operátor koordináta reprezentációbeli alakját:

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad (2.102)$$

$$T(X) = e^{\frac{i}{\hbar} X \hat{p}_x} \quad (2.103)$$

Hasonlóan vezethetjük le három dimenzióban is az eltolás operátort:

$$T(\mathbf{R}) = e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{R} \hat{\mathbf{p}}} \quad (2.104)$$

2.2 Megoldás *Először írjuk fel egy vektor kicsiny $\Delta\varphi$ szöggel történő infinitezimális elforgatását \mathbf{n} egységvektor körül:*

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \Delta\varphi \mathbf{n} \times \mathbf{r} \quad (2.105)$$

Az $R(\Delta\varphi, \mathbf{n})f(\mathbf{r}) = f(R^{-1}(\Delta\varphi, \mathbf{n})\mathbf{r})$ transzformációt $\Delta\varphi$ -ben első rendben a következőképpem írhatjuk fel:

$$f(R^{-1}(\Delta\varphi, \mathbf{n})\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} - \Delta\varphi \mathbf{n} \times \mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) - \Delta\varphi \mathbf{n} \times \mathbf{r} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \quad (2.106)$$

Használjuk fel az impulzus operátort az infinitezimális forgatás operátorának leírásához:

$$f(R^{-1}(\Delta\varphi, \mathbf{n})\mathbf{r}) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \Delta\varphi \mathbf{n} (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \right) f(\mathbf{r}) \quad (2.107)$$

A fenti képletben felismerhetjük az impulzusmomentum $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ operátort, vagyis

$$f(R^{-1}(\Delta\varphi, \mathbf{n})\mathbf{r}) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \Delta\varphi \mathbf{n} \mathbf{L} \right) f(\mathbf{r}) \quad (2.108)$$

Egy tetszőlegesen nagy szöggel történő elforgatás esetén osszuk fel a teljes forgatás szögét m egyenlő kis darabra. A teljes forgatáshoz m -szer kell alkalmaznunk az előző képletet egy kicsiny φ/m szöggel történő forgatásra:

$$\hat{O}(\varphi, \mathbf{n}) : f(\mathbf{r}) = \lim_{m \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{1}{m} \left(\frac{i}{\hbar} \varphi \mathbf{n} \mathbf{L} \right) \right)^m f(\mathbf{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \mathbf{n} \mathbf{L}} f(\mathbf{r}) \quad (2.109)$$

2.3 Megoldás Tételezzük fel, hogy egy adott energia sajátértékhez két egymástól lineárisan független hullámfüggvény tartozik:

$$\phi_1'' = \frac{2m}{\hbar^2} (V - E) \phi_1, \quad \phi_2'' = \frac{2m}{\hbar^2} (V - E) \phi_2. \quad (2.110)$$

Ebből nyilvánvalóan következik, hogy

$$\phi_1''\phi_2 - \phi_2''\phi_1 = (\phi_1'\phi_2)' - (\phi_2'\phi_1)' = 0. \quad (2.111)$$

Az előző egyenlet integrálásával a következő összefüggést kapjuk:

$$\phi_1'\phi_2 - \phi_2'\phi_1 = \text{const.} \quad (2.112)$$

A kötött állapotok hullámfüggvényei és azok deriváltjai el kell, hogy tűnjenek a végtelenben, ezért az előző egyenletben szereplő konstans nulla lesz, vagyis

$$\frac{\phi_1'}{\phi_1} = \frac{\phi_2'}{\phi_2}. \quad (2.113)$$

Mindkét oldalt integrálva,

$$\ln \phi_1 = \ln \phi_2 + C \Rightarrow \phi_1 = C\phi_2. \quad (2.114)$$

Ez az eredmény azonban ellentmondásban van a hullámfüggvények lineáris függetlenségével, tehát a kezdeti feltételezésünk hamis volt.

2.4 Megoldás Az értelmezési tartományt érdemes három részre osztani:

$$\begin{array}{ccc} I & II & III \\ x < 0 & 0 < x < L & L < x \end{array}$$

Az I és III részben végtelen a potenciál, így a (2.25) egyenlet bal oldalán végtelen szerepel. A jobb oldalon végtelennek kellene lennie emiatt az energiának, ami fizikailag nem értelmes. A probléma feloldása az, hogy az állapotfüggvény azonosan 0, vagyis $\psi_I(x) = \psi_{III}(x) \equiv 0$. A II tartományban a Schrödinger-egyenlet a $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$ alakot ölti. A határfeltételeket az állapotfüggvény folytonossága biztosítja, vagyis $\psi_I(0) = \psi_{II}(0) = 0$, illetve $\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L) = 0$. A folytonossági kritérium eléggé légbőlkapottnak tűnik ezen ponton, azonban képzeljük el azt az esetet, amikor a potenciállal nem végtelen magas, hanem csak valamilyen véges V_0 értéket vesz fel a két oldalon. Ezt az esetet a következő példában fogjuk tárgyalni. Ekkor sehol sem jelennek meg végtelenek az egyenletben, tehát $\psi(x)$ -nek mindenütt jól kell viselkednie, ami itt a kétszer deriválhatóságot jelenti. A 2.5. példában látni fogjuk, hogy ha ekkor vesszük a $V_0 \rightarrow \infty$ határesetet, akkor az állapotfüggvény folytonos marad. A kapott differenciálegyenlet - konstansoktól eltekintve - az 1.12. példa! A $\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$ ansatz-ból a $\psi(0) = 0$ peremfeltétel miatt csak a szinuszos tag marad. Ezt behelyettesítve a Schrödinger-egyenletbe kapjuk, hogy

$$A^2 \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \sin^2(kx) = A^2 E \sin^2(kx)$$

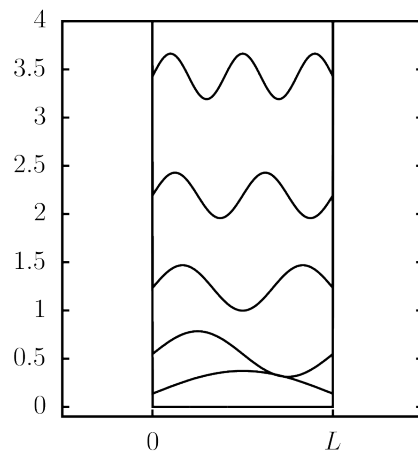
A^2 -tel egyszerűsítve innen $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. A $\psi(L) = 0$ peremfeltétel miatt $k = \frac{n\pi}{L}$, vagyis k értéke csak diszkrét (kvantált) értékeket vehet fel. Az A konstans értékét az állapotfüggvény normáltsága adja:

$$\int_0^L |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = A^2 \frac{L}{2} = 1, \text{ azaz } A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Tehát az állapotfüggvények a

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

alakot öltik, melyek a következő ábrán láthatóak a jobb láthatóság kedvéért a megfelelő energiákkal eltolva.

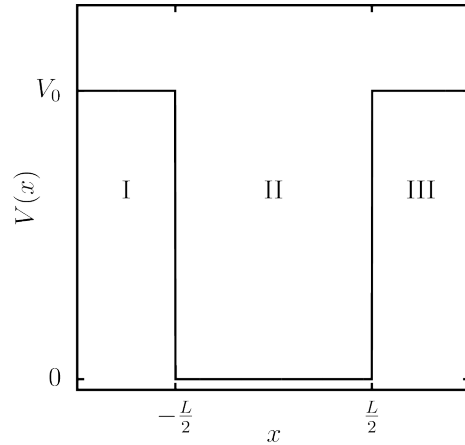


k kvantáltsága miatt a $\psi_n(x)$ -hez tartozó energia is csak a megfelelő $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$ értékeket veheti fel. Vagyis ha ezen a rendszeren energiámérést végzünk nem kaphatunk a részecske energiájára bármilyen értéket, csak bizonyos megengedett energiaszinteken ülhetnek részecskék. Ez egy újabb lényeges eltérés a klasszikus világhoz képest, azonban összevág az atomok vonalas színekével, ott is hasonló a helyzet. Látszik tehát az elsőre bizonyára furcsának és ad hocnak tűnő második axióma motivációja: A kvantumvilágot leíró modellnek biztosítania kell, hogy az egyes fizikai mennyiségek lehetséges értékei lehessenek diszkrét vagy folytonosan változó valós számok. A Hilbert-téren ható lineáris önadjungált operátorok spektrumának azonosítása a mennyiségek mérhető értékeivel éppen ezt a lehetőséget biztosítja!

2.5 Megoldás Osszuk fel teret három tartományra az ábrának megfelelően. Az első és harmadik tartományban az időfüggetlen Schrödinger egyenlet alakja a következő lesz:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = E \varphi(x)$$

Csak akkor kaphatunk lecsengő megoldásokat, azaz normálható hullámfüggvényt, ha a sajátenergia negatív.



Az I. tartományban a hullámfüggvény $\varphi(x) = Ae^{\alpha x}$, a III. tartományban $\varphi(x) = De^{-\alpha x}$, ahol

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}. \quad (2.115)$$

A II. tartományban az időfüggetlen Schrödinger egyenletet a következőképpen lehet felírni:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} = (E + V_0)\varphi(x)$$

A megoldások alakja

$$\varphi(x) = B \cos(kx) + C \sin(kx), \quad \text{ahol } k = \sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}}.$$

α és k között egyszerű összefüggés áll fenn:

$$\alpha^2 + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}. \quad (2.116)$$

A tartományok határain a hullámfüggvényeknek és azok deriváltjainak folytonosnak kell lenniük, hogy $\varphi(x)$ kétszer deriválható legyen és betehessük a Schrödinger-egyenletbe:

I/II tartomány határa

II/III tartomány határa

$$Ae^{-\alpha a} = B \cos(ka) - C \sin(ka)$$

$$Ae^{-\alpha a} = B \cos(ka) - C \sin(ka)$$

$$Ae^{-\alpha a} = B \cos(ka) - C \sin(ka)$$

$$Ae^{-\alpha a} = B \cos(ka) - C \sin(ka)$$

Adjuk össze és vonjuk ki egymásból az egymás melletti egyenleteket:

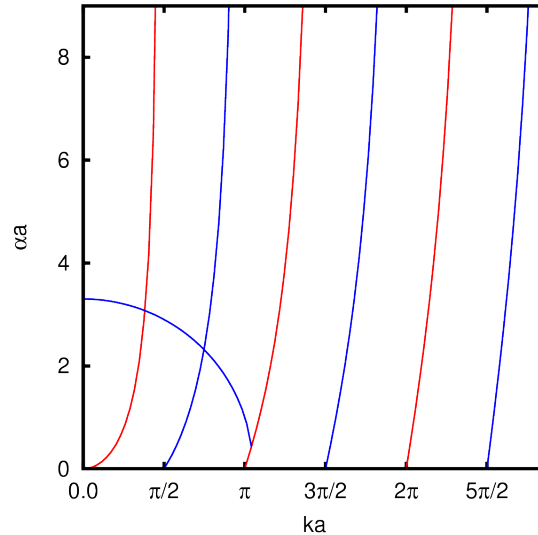
$$(A + D)e^{-\alpha a} = 2B \cos(ka) \quad \alpha(A + D)e^{-\alpha a} = 2kB \sin(ka) \quad (2.117)$$

$$(A - D)e^{-\alpha a} = -2C \sin(ka) \quad \alpha(A - D)e^{-\alpha a} = 2kC \cos(ka) \quad (2.118)$$

Az amplitúdókat eltüntethetjük, ha elosztjuk egymással az egyenleteket:

$$\alpha = k \tan(ka) \quad (2.119)$$

$$\alpha = -k \cot(ka) \quad (2.120)$$



2.1. ábra. Az $ka \tan(ka)$ (fekete folytonos vonal) és $-ka \cot(ka)$ (zöld szaggatott vonal) függvények, valamint a 2.116. számú egyenlet által adott kör (kék szaggatott vonal).

A 2.1. számú ábráról leolvasható, hogy a (2.119) és (2.120) egyenletek nem elégíthetők ki egyszerre, viszont a (2.117) és (2.118) egyenleteknek teljesülnie kell. Bontsuk két részre a lehetséges megoldásokat: ha a (2.119) teljesül akkor a (2.118) számú egyenletek csak akkor elégülhetnek ki, ha $A = D$ és $C = 0$. Ha a másik, (2.120) számú egyenlet teljesül, akkor $A = -D$ és $B = 0$. Vizsgáljuk meg a két különböző típusú megoldás szimmetria tulajdonságait:

a.)

$$\alpha a = ka \tan(ka), \quad A = D \text{ és } C = 0.$$

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ae^{\alpha x} & \text{ha } x \leq -a \\ B \cos(kx) & \text{ha } -a \leq x \leq a \\ Ae^{-\alpha x} & \text{ha } x \geq a \end{cases}$$

Az ebbe az osztályba tartozó hullámfüggvények párosak lesznek. Az energiát a 2.1. ábráról olvashatjuk le az (2.116) egyenlet által meghatározott kör és a $ka \tan(ka)$ függvény metszéspontjaiban.

b.)

$$\alpha a = -ka \cot(ka), \quad A = -D \text{ és } B = 0.$$

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ae^{\alpha x} & \text{ha } x \leq -a \\ C \sin(kx) & \text{ha } -a \leq x \leq a \\ -Ae^{-\alpha x} & \text{ha } x \geq a \end{cases}$$

Az ebbe az osztályba tartozó hullámfüggvények páratlanok lesznek. Az energiát a 2.1. ábráról olvashatjuk le az 2.116 egyenlet által meghatározott kör és a $-ka \cot(ka)$ függvény metszéspontjaiban.

A 2.1. ábráról leolvashatjuk a megoldások számát is (ahol $\lfloor x \rfloor$ az x alsó egészrészét jelöli):

$$n = \left\lfloor \frac{2a}{\pi} \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \right\rfloor + 1.$$

Megjegyzés: A potenciál és a Hamilton operátor invariáns a tükrözéssel szemben, ami matematikailag azt jelenti, hogy a Hamilton-operátor és a tükrözés operátora kommutál. Az 1.17. tétel alapján ebből következik, hogy a tükrözés operátorának és a Hamilton operátornak közös sajátfüggvény rendszere van. A tükrözés operátorának a sajátértékei 1 és -1 lehetnek, vagyis az időfüggetlen Schrödinger egyenlet megoldásai is vagy nem változnak előjelet vagy előjelet váltanak a tükrözés hatására.

Végtelen mély potenciál gödör határeset: Ha $V_0 \rightarrow \infty$, akkor az 2.1. ábrán a tangens és minusz kotangens függvények függőleges vonalakká válnak. A kör sugara tart a végtelenhez, vagyis megfelelő magasságban vízszintesen metszi a tangens, minusz kotangens függvényeket. A metszéspontok nyilvánvalóan a $ka = n\pi/2$ értékeknél lesznek, vagyis $k_n = n\frac{\pi}{2a}$. A 2.4. példában előretartunk, hogy a határon az állapotfüggvény 0-hoz tart, nézzük meg most ezt! $D \neq 0$, $C = 0$ esetben, ha $V_0 \rightarrow \infty$, akkor az állapotfüggvény a határon $\varphi(a) = B \cos ka \rightarrow B \cos \pi/2 = 0$. Hasonló következik a páratlan megoldásokból is, vagyis ezzel igazoltuk a 2.4. példában felhasznált peremfeltételt az I-II illetve II-III tartomány határán. A megoldás $a = 3$ szélesség, és változó V_0 mellett itt látható, az állapotfüggvények a jobb láthatóság kedvéért el vannak tolvva függőlegesen a megfelelő energia értékével. V_0 emelésével egyre több állapot jelenik meg, melyek exponenciális levágása egyre erősebb, ahogy V_0 nő $k = \sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}}$ miatt.

Dirac-delta potenciál: Tartsunk a potenciál $2a$ szélességével nullához úgy, hogy a potenciál magasságának és a szélességének a szorzata maradjon állandó:

$2V_0a = \gamma$. Vizsgáljuk meg, hogyan viselkedik a ka szorzat:

$$ka = a \sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}} \stackrel{V_0 \rightarrow \infty}{\approx} \sqrt{\frac{a\gamma}{\hbar^2}}. \quad (2.121)$$

Tehát a ka szorzat is tart nullához. Az 2.1 ábráról leolvashatjuk, hogy csak egy metszéspontunk lesz, vagyis csak egy kötött állapotot kapunk. Fejtsük sorba a tangens függvényt a (2.119) egyenletben:

$$\alpha a = (ka)^2 = \frac{a\gamma}{\hbar^2} \Rightarrow \alpha = \frac{m\gamma}{\hbar^2},$$

amely már független a potenciál gödör szélességétől.

2.6 Megoldás Legyen az időfüggetlen Schrödinger egyenletnek a következő alakja:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} - \gamma\delta(x)\varphi(x) = E\varphi(x)$$

Integráljuk az egyenlet mindkét oldalát egy kicsiny $-\varepsilon$ értéktől ε -ig:

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} - \gamma\delta(x)\varphi(x) \right) dx = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} E\varphi(x) dx .$$

Feltételezhetjük, hogy a sajátenergia véges, ezért ha az ε mennyiségekkel tartunk nullához, akkor a jobb oldal eltűnik:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d\varphi(+0)}{dx} - \frac{d\varphi(-0)}{dx} \right) = \gamma\varphi(0) ,$$

tehát a hullámfüggvény deriváltjának a Dirac-delta helyén ugrása van:

$$\frac{d\varphi(+0)}{dx} - \frac{d\varphi(-0)}{dx} = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\varphi(0) . \quad (2.122)$$

A Dirac-delta jobb- és baloldalán lecsengő megoldásoknak kell lenniük:

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ae^{\alpha x} & \text{ha } x \leq 0 \\ Ae^{-\alpha x} & \text{ha } x \geq 0 \end{cases}$$

Használjuk ki a hullámfüggvény deriváltjaira vonatkozó (2.122) feltételt:

$$-A\alpha - A\alpha = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2}A ,$$

ahonnan $\alpha = \frac{m\gamma}{\hbar^2}$ adódik, megegyezően a 2.5. feladat utolsó pontjának a megoldásával.

2.7 Megoldás A Hamilton operátor invariáns a tükrözéssel szemben, ezért a sajátállapotokat feloszthatjuk páros és páratlan hullámfüggvényekre. Osszuk fel a teret három tartományra:

$$x \leq -a$$

A hullámfüggvény alakja: $\varphi(x) = Ae^{\alpha x}$, ahol $\alpha = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$.

$$-a \leq x \leq a$$

A hullámfüggvény alakja páros esetben: $\varphi(x) = B \cosh(\alpha x)$, páratlan esetben $\varphi(x) = B \sinh(\alpha x)$.

$$x \geq a$$

A hullámfüggvény alakja páros esetben: $\varphi(x) = Ae^{-\alpha x}$, páratlan esetben $\varphi(x) = -Ae^{-\alpha x}$.

Páros megoldás:

Miután a hullámfüggvény alakjában kihasználtuk a tükrözési szimmetriát, elegendő

a határfeltételeket csak az egyik Dirac-delta helyén kiróni, ekkor a másik Dirac-delta helyén a hátrfeltételek automatikusan teljesülnek:

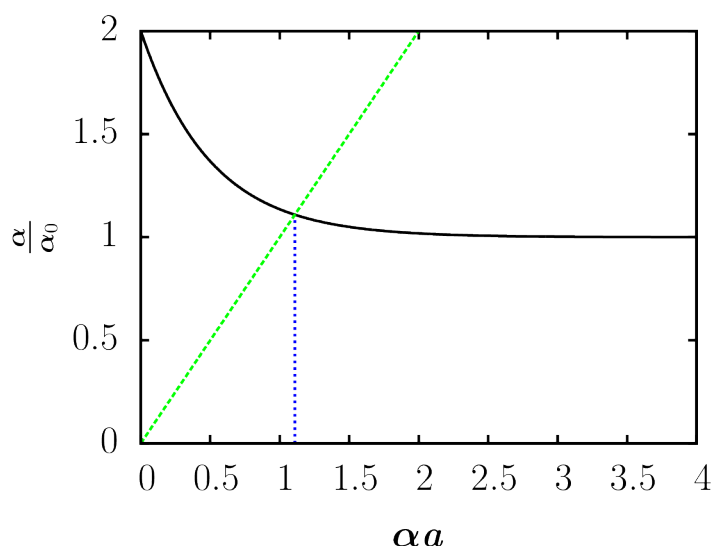
$$\begin{aligned} Ae^{-\alpha a} &= B \cosh(\alpha a) \\ -\frac{2m}{\hbar^2} K A e^{-\alpha a} &= -B\alpha \sinh(\alpha a) - A\alpha e^{-\alpha a} \end{aligned}$$

Felhasználva az első egyenletet a következő összefüggést kapjuk:

$$\frac{2m}{\hbar^2} K = \alpha [\tanh(\alpha a) + 1]$$

Kifejezve a $\tanh(x)$ függvényt exponenciális függvényekkel az előző egyenletet az alábbi alakra hozhatjuk:

$$\alpha a = a\alpha_0 (1 + e^{-2\alpha a}) \quad , \quad \alpha_0 = \frac{m}{\hbar^2} K \quad (2.123)$$



A (2.123) egyenlet grafikus megoldása $\alpha_0 = 1$ esetén.

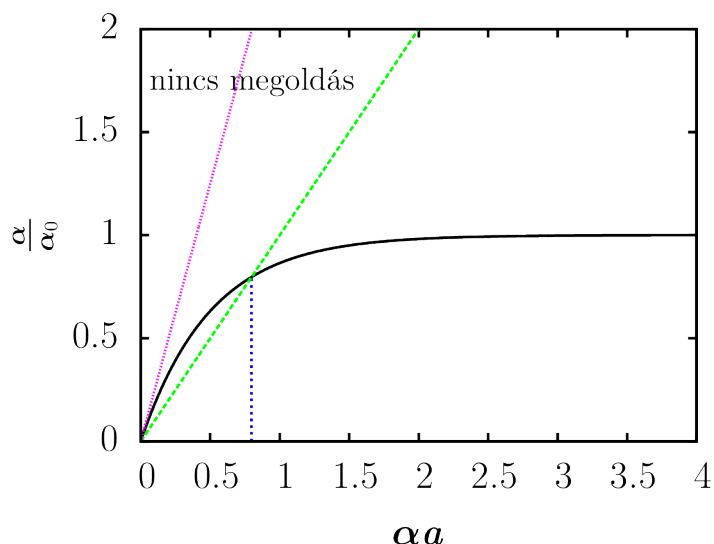
Páratlan megoldás:

A határfeltételek a baloldali Dirac-delta helyén:

$$\begin{aligned} Ae^{-\alpha a} &= -B \sinh(\alpha a) \\ -\frac{2m}{\hbar^2} K A e^{-\alpha a} &= B\alpha \cosh(\alpha a) - A\alpha e^{-\alpha a} \end{aligned}$$

A páros megoldáshoz hasonlóan a következő feltételből határozhatjuk meg az energiát:

$$\alpha a = \alpha_0 a (1 - e^{-2\alpha a}) \quad (2.124)$$



A 2.124. számú egyenlet grafikus megoldása $\alpha\alpha_0 = 1$ esetén.

Az ábráról leolvasható, hogy ha a (2.124) egyenlet meredeksége a nulla pontban kicsi, akkor a páratlan kötött állapot nem létezik: $2\alpha_0 a > 1$.

2.8 Megoldás Negatív energiás kötött állapot: $E < 0$

Ebben az esetben csak páros megoldás létezhet.

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \quad (2.125)$$

Vezessük be az előző példához hasonlóan az α_0 paramétert: $\alpha_0 = \frac{m}{\hbar^2}K$. A hullámfüggvénynek $-a$ -ban és a -ban el kell tűnnie és ki kell elégítenie a szabad Schrödinger egyenletet:

$$\varphi(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } |x| \geq a \\ A \sinh(\alpha(a+x)) & \text{ha } -a \leq x \leq 0 \\ A \sinh(\alpha(a-x)) & \text{ha } 0 \leq x \leq a \end{cases} \quad (2.126)$$

A Dirac-delta helyén kiróva a határfeltételt a következő egyenletet kapjuk:

$$\begin{aligned} -2A\alpha \cosh(\alpha a) &= 2\alpha_0 A \sinh(\alpha a) \text{ vagy} \\ \alpha a &= \alpha_0 a \tanh(\alpha a) \end{aligned}$$

A fenti egyenletnek csak akkor van megoldása, ha a $\tanh(x)$ függvény meredeksége az origóban nagyobb, mint $1/(\alpha_0 a)$, vagyis $\alpha_0 a > 1$.

Pozitív energiás kötött állapot: $E > 0$

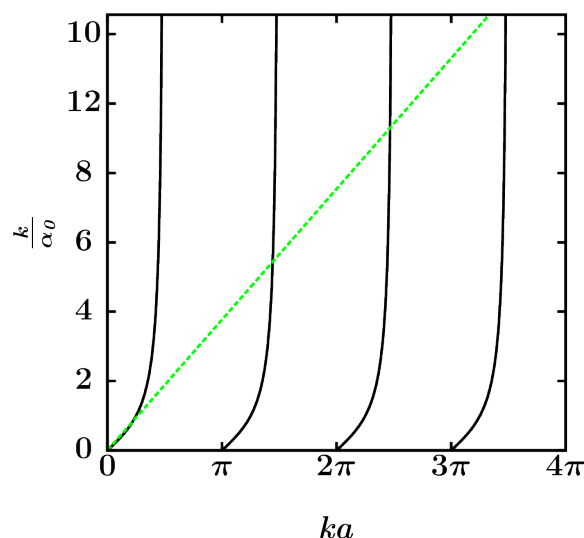
A végtelen magas potenciál gödör páratlan megoldási változatlanok maradnak, rájuk nincs hatással a Dirac-delta potenciál. A páros megoldásokat az előző esethez hasonlóan állíthatjuk elő: $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, a hullámfüggvényben pedig $\sin(kx)$ függvény szerepel $\sinh(\alpha x)$ helyett:

$$\varphi(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } |x| \geq a \\ A \sin(\alpha(a+x)) & \text{ha } -a \leq x \leq 0 \\ A \sin(\alpha(a-x)) & \text{ha } 0 \leq x \leq a \end{cases} \quad (2.127)$$

Kihasználva a Dirac-delta potenciálra kirótt határfeltételeket a következő egyenletet kapjuk:

$$ka = \alpha_0 a \tan(ka) \quad (2.128)$$

Az megoldáshoz tartozó ábráról leolvashatjuk, hogy végtelen sok megoldásunk van és a sajátenergiák egyre kevésbé tolódnak el a végtelen potenciálgödör sajátenergiáihoz képest az egyre magasabb gerjesztett állapotok esetén.



A végtelen magas potenciál gödörbe helyezett vonzó Dirac-delta potenciál pozitív energiás grafikus megoldásai $a\alpha_0 = 1$ esetén.

Lineáris állapot: $E = 0$

Miután a hullámfüggvényünk kompakt tartójú, kereshetjük a megoldást lineáris polinom alakban is, hiszen ennek második deriváltja nyilvánvalóan eltűnik:

$$\varphi(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } |x| \geq a \\ A(a+x) & \text{ha } -a \leq x \leq 0 \\ A(a-x) & \text{ha } 0 \leq x \leq a \end{cases} \quad (2.129)$$

A határfeltétel az origóban a következő lesz:

$$-2A = -2\alpha_0 Aa \quad (2.130)$$

tehát $\alpha_0 a = 1$ esetén lehetséges nulla energiájú, lineáris hullámfüggvény.

2.9 Megoldás A hullámfüggvény alakja a különböző tartományokban a következő alakú lesz:

$$\varphi(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } x \leq -a \\ A \sinh(\alpha x) & \text{ha } -a \leq x \leq a \\ Ae^{-\alpha x} & \text{ha } x \geq a \end{cases} \quad (2.131)$$

Ez az alak megegyezik a 2.7. feladat páratlan sajátállapotának az alakjával a pozitív tartományban, a negatív tartományban magától értetődően nulla. A Dirac-deltára vonatkozó határfeltételek is megegyeznek a két esetben, tehát a sajátenergiát a következő feltételből határozhatjuk meg:

$$\alpha a = \alpha_0 a (1 - e^{-2\alpha a}) . \quad (2.132)$$

Ez a kötött állapot is csak a $2\alpha_0 a > 1$ feltétel teljesülése esetén létezik, hasonlóan a 2.7. feladat páratlan megoldásához.

2.10 Megoldás A 2.5. feladat páratlan megoldásához hasonlóan a hullámfüggvény alakja a következő lesz:

$$\varphi(x) = \begin{cases} 0 & , \text{ ha } x \leq 0 \\ A \sin(kx) & , \text{ ha } 0 \leq x \leq a \\ B e^{-\alpha x} & , \text{ ha } x \geq a \end{cases}$$

ahol

$$k = \sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}. \quad (2.133)$$

A határfeltételek ugyanazt az egyenletet eredményezik mint amit a 2.5. feladat páratlan megoldására kaptunk:

$$\alpha a = -ka \cot(ka) \quad (2.134)$$

A 2.5. feladat 2.1 ábrájáról látható, hogy a (2.116) egyenlet által definiált körrel csak akkor van metszéspontja az előző egyenletnek, ha a kör sugara nagyobb mint $\pi/2$:

$$a \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} > \frac{\pi}{2} \quad \Rightarrow \quad V_0 > \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad (2.135)$$

2.11 Megoldás

$$\begin{aligned} c_n &= \langle \varphi_n | \psi \rangle = \frac{\sqrt{15}}{4a^3} \int_{-a}^a \sin\left[\frac{\pi n}{2a}(x+a)\right] (a^2 - x^2) dx \\ &= \frac{\sqrt{15}}{4a^3} \int_0^{2a} \sin\left(\frac{\pi n}{2a}x\right) x(2a-x) dx = \frac{2\sqrt{15}}{\pi^3 n^3} \int_0^{\pi n} \sin(t) t(\pi n - t) dt \\ &= \frac{2\sqrt{15}}{\pi^3 n^3} \left(\pi n \int_0^{\pi n} \sin(t) t dt - \int_0^{\pi n} \sin(t) t^2 dt \right) \\ &= \frac{2\sqrt{15}}{\pi^3 n^3} \left(\pi n [\sin t - t \cos t]_0^{\pi n} - [-t^2 \cos t + 2 \cos t + 2t \sin t]_0^{\pi n} \right) \\ &= \frac{2\sqrt{15}}{\pi^3 n^3} \left(-(\pi n)^2 (-1)^n + [-t^2 \cos t + 2 \cos t + 2t \sin t]_0^{\pi n} \right) \\ &= \frac{4\sqrt{15}}{\pi^3 n^3} (1 - (-1)^n) \end{aligned} \quad (2.136)$$

Innen

$$|c_n|^2 = \frac{240}{\pi^6 n^6} (1 - (-1)^n)^2 = \frac{240}{\pi^6 n^6} (2 - 2(-1)^n) = \frac{480}{\pi^6 n^6} (1 - (-1)^n) \quad (2.137)$$

$$\left(\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = \frac{480}{\pi^6} \left(\frac{1}{945} \pi^6 + \frac{31}{30 \cdot 240} \pi^6 \right) = 1 \right)$$

$$|c_n|^2 E_n^2 = \frac{15\hbar^4}{2\pi^2 m^2 a^4} \frac{1}{n^2} (1 - (-1)^n) \quad (2.138)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n^2 = \frac{15\hbar^4}{2\pi^2 m^2 a^4} \left(\frac{\pi^2}{6} - \frac{\pi^2}{12} \right) = \frac{15\hbar^4}{24m^2 a^4}. \quad (2.139)$$

Ahhoz, hogy belássuk, hogy a fenti eredmény a helyes, térjünk vissza az $L^2(\mathbb{R})$ Hilbert-térhez és definiáljuk a ψ függvényt, mint

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{15}}{4a^{5/2}} (a^2 - x^2) (\Theta(x+a) - \Theta(x-a)) , \quad (2.140)$$

ahol Θ a lépcsőfüggvény. Innen

$$\psi'(x) = -\frac{\sqrt{15}}{2a^{5/2}} x (\Theta(x+a) - \Theta(x-a)) , \quad (2.141)$$

$$\begin{aligned} \psi''(x) &= -\frac{\sqrt{15}}{2a^{5/2}} (\Theta(x+a) - \Theta(x-a)) \\ &\quad + \frac{\sqrt{15}}{2a^{3/2}} (\delta(x+a) + \delta(x-a)) , \end{aligned} \quad (2.142)$$

ahol δ a Dirac-delta disztribúció,

$$\begin{aligned} \psi'''(x) &= -\frac{\sqrt{15}}{a^{5/2}} (\delta(x+a) - \delta(x-a)) \\ &\quad + \frac{\sqrt{15}}{2a^{3/2}} (\delta'(x+a) + \delta'(x-a)) , \end{aligned} \quad (2.143)$$

és

$$\begin{aligned} \psi''''(x) &= -\frac{\sqrt{15}}{a^{5/2}} (\delta'(x+a) - \delta'(x-a)) \\ &\quad + \frac{\sqrt{15}}{2a^{3/2}} (\delta''(x+a) + \delta''(x-a)) . \end{aligned} \quad (2.144)$$

Mivel

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x-a) f(x) dx = -f'(a) , \quad (2.145)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta''(x-a) f(x) dx = f''(a) , \quad (2.146)$$

$$\begin{aligned} \langle \psi | H^2 | \psi \rangle &= \frac{\sqrt{15}}{a^{5/2}} \frac{\hbar^4}{4m^2} [\psi'(a) - \psi'(-a)] + \frac{\sqrt{15}}{2a^{3/2}} \frac{\hbar^4}{4m^2} [\psi''(+a) + \psi''(-a)] \\ &= \frac{15}{a^4} \frac{\hbar^4}{4m^2} + \frac{\sqrt{15}}{2a^{3/2}} \frac{\hbar^4}{4m^2} \left(-\frac{\sqrt{15}}{a^{5/2}} \right) \\ &= \frac{15\hbar^4}{8m^2 a^4} \end{aligned} \quad (2.147)$$

2.12 Megoldás Határozzuk meg az energia paraméter szerinti deriváltját:

$$\frac{dE}{da} = \frac{d}{da} \langle \varphi | H | \varphi \rangle = \left\langle \frac{d\varphi}{da} | H | \varphi \right\rangle + \left\langle \varphi | H | \frac{d\varphi}{da} \right\rangle + \left\langle \varphi | \frac{dH}{da} | \varphi \right\rangle \quad (2.148)$$

Az első két tagban használjuk ki, hogy $|\varphi\rangle$ sajátállapota a Hamilton operátornak E sajátenergiával:

$$\left\langle \frac{d\varphi}{da} \middle| H \middle| \varphi \right\rangle + \left\langle \varphi \middle| H \middle| \frac{d\varphi}{da} \right\rangle = E \left(\left\langle \frac{d\varphi}{da} \middle| \varphi \right\rangle + \left\langle \varphi \middle| \frac{d\varphi}{da} \right\rangle \right) = E \frac{d}{da} \langle \varphi | \varphi \rangle = 0 \quad (2.149)$$

Mivel a hullámfüggvény normált, az előző egyenlet utolsó tagja eltűnik. Visszaírva ezt az energia deriváltjába

$$\frac{dE}{da} = \left\langle \varphi \middle| \frac{dH}{da} \middle| \varphi \right\rangle = \left\langle \varphi \middle| \frac{dV}{da} \middle| \varphi \right\rangle \quad (2.150)$$

2.13 Megoldás Alkalmazzuk a (3.52) képletben szereplő kvantummechanikai időderiváltat az x operátorra:

$$[H, x] = \frac{\hbar}{i} \dot{x} \quad (2.151)$$

és helyettesítsük be az $[x, p]$ kommutátorba:

$$\begin{aligned} m \frac{i}{\hbar} \langle n | [x, [H, x]] | n \rangle &= m \frac{i}{\hbar} \langle n | x [H, x] | n \rangle - m \frac{i}{\hbar} \langle n | [H, x] x | n \rangle \\ &= m \frac{i}{\hbar} \sum_k (\langle n | x | k \rangle \langle k | [H, x] | n \rangle - \langle n | [H, x] | k \rangle \langle k | x | n \rangle) = i\hbar \end{aligned}$$

Fejtsük ki a fenti képletben szereplő kommutátorokat:

$$\langle n | [H, x] | k \rangle = \langle n | Hx | k \rangle - \langle n | xH | k \rangle = (E_n - E_k) \langle n | x | k \rangle, \quad (2.152)$$

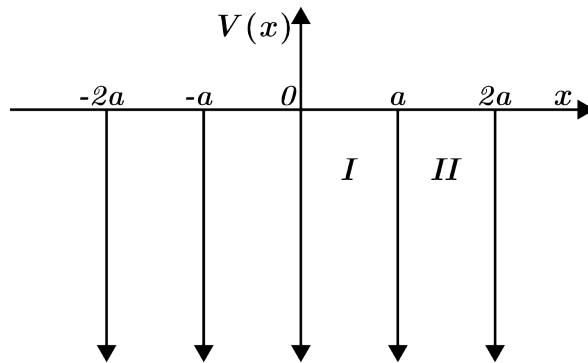
és helyettesítsük be az eredeti képletbe:

$$m \frac{i}{\hbar} \langle n | [x, [H, x]] | n \rangle = m \frac{i}{\hbar} \sum_k 2(E_k - E_n) \langle n | x | k \rangle \langle k | x | n \rangle = i\hbar. \quad (2.153)$$

Innen

$$\sum_k (E_k - E_n) \langle n | x | k \rangle \langle k | x | n \rangle = \frac{\hbar^2}{2m}. \quad (2.154)$$

2.14 Megoldás A 2.91 számú potenciálban a $-\gamma\delta(x-a)$ potenciál ismétlődik periodikusan:



Tekintsük a negatív energiás tartományt! Az I-es és a II-es tartományban a hullámfüggvény alakja a következő:

$$\varphi_I(x) = A_1 e^{\alpha x} + B_1 e^{-\alpha x} \quad (2.155)$$

$$\varphi_{II}(x) = A_2 e^{\alpha(x-a)} + B_2 e^{-\alpha(x-a)}, \quad (2.156)$$

ahol $\alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} |E|}$. A Dirac-delta potenciál helyén a következő feltételeknek kell teljesülnie:

$$\varphi_I(a) = \varphi_{II}(a), \quad \varphi'_{II}(a) - \varphi'_I(a) = -\frac{2m}{\hbar^2} \gamma \varphi_I(a). \quad (2.157)$$

Ha az előző feltételekbe behelyettesítjük a (2.155)-(2.156) számú hullámfüggvényeket, a következő egyenleteket kapjuk:

$$A_1 e^{\alpha a} + B_1 e^{-\alpha a} = A_2 + B_2 \quad (2.158)$$

$$\alpha A_2 - \alpha B_2 - \alpha A_1 e^{\alpha a} + \alpha B_1 e^{-\alpha a} = -\frac{2m}{\hbar^2} \gamma (A_1 e^{\alpha a} + B_1 e^{-\alpha a}) \quad (2.159)$$

Egy oldalra rendezve az I-es és II-es tartományokhoz tartozó amplitúdókat írjuk át az előző egyenleteket:

$$A_1 e^{\alpha a} + B_1 e^{-\alpha a} = A_2 + B_2 \quad (2.160)$$

$$\left(1 - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\gamma}{\alpha}\right) e^{\alpha a} A_1 - \left(1 + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\gamma}{\alpha}\right) e^{-\alpha a} B_1 = A_2 - B_2 \quad (2.161)$$

Írjuk fel mátrix alakban az előző egyenleteket:

$$\begin{pmatrix} e^{\alpha a} & e^{-\alpha a} \\ \left(1 - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\gamma}{\alpha}\right) e^{\alpha a} & -\left(1 + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\gamma}{\alpha}\right) e^{-\alpha a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad (2.162)$$

A jobboldalon lévő mátrix inverzével beszorozva mindkét oldalt a következő alakra hozhatjuk az előző egyenletet:

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\alpha a} & e^{-\alpha a} \\ \left(1 - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\gamma}{\alpha}\right) e^{\alpha a} & -\left(1 + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\gamma}{\alpha}\right) e^{-\alpha a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad (2.163)$$

$$\begin{pmatrix} \left(1 - \frac{m}{\hbar^2} \frac{\gamma}{\alpha}\right) e^{\alpha a} & -\frac{m}{\hbar^2} \frac{\gamma}{\alpha} e^{-\alpha a} \\ \frac{m}{\hbar^2} \frac{\gamma}{\alpha} e^{\alpha a} & \left(1 + \frac{m}{\hbar^2} \frac{\gamma}{\alpha}\right) e^{-\alpha a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad (2.164)$$

Az egyenlet bal oldalán álló mátrixot transzfer mátrixnak hívjuk. Segítségével a i -dik tartomány amplitúdójából megkaphatjuk a következő tartomány amplitúdóit:

$$\mathbf{T} \begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{pmatrix} \quad (2.165)$$

Ha egy N cellából álló láncunk van periódikus határfeltétellel, akkor

$$\mathbf{T}^N \mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_0, \quad (2.166)$$

ahol \mathbf{x}_i az (A_i, B_i) amplitúdókból álló vektor. Vizsgáljuk meg a \mathbf{T} transzfer mátrix néhány tulajdonságát! A (2.166) számú határfeltétel esetén a transzfer mátrix sajátértékeinek

nyilvánvalóan egységgyököknek kell lennie: $\lambda_1 = e^{i\varphi}$, $\lambda_2 = e^{-i\varphi}$ és $\text{Tr}\{\mathbf{T}\} = 2 \cos(\varphi) \leq 2$. Könnyen ellenőrizhetjük emellett, hogy a determinánsa egységnyi, vagyis a mátrix unitér. Ebből a feltételből egyszerűen meghatározhatjuk azt az energia tartományt - energia sávot - ahol a periódikus határfeltétel teljesül:

$$\text{Tr}\{\mathbf{T}\} = \left(1 - \frac{m\gamma}{\hbar^2\alpha}\right) e^{\alpha a} + \left(1 + \frac{m\gamma}{\hbar^2\alpha}\right) e^{-\alpha a} = 2\text{ch}(\alpha a) - 2\frac{m\gamma}{\hbar^2\alpha}\text{sh}(\alpha a) \leq 2 \quad (2.167)$$

$$\frac{m\gamma}{\hbar^2\alpha}\text{sh}\left(\frac{\alpha a}{2}\right)\text{ch}\left(\frac{\alpha a}{2}\right) \geq \text{sh}^2\left(\frac{\alpha a}{2}\right) \quad (2.168)$$

$$\frac{m\gamma}{\hbar^2}a \geq \alpha a \tanh\left(\frac{\alpha a}{2}\right) \quad (2.169)$$

Pozitív energiákra a 2.155 számú hullámfüggvényben α helyére a tisztán képzetes ik hullámszám kerül, így a 2.169 feltétel a következőképpen módosul:

$$\frac{m\gamma}{\hbar^2}a \leq ka \tan\left(\frac{ka}{2}\right) \quad (2.170)$$

2.15 Megoldás A feladat megoldásához először szükségünk lesz a segítségben megadott azonosságok belátására, melyek közül az elsőt írjuk le, a második hasonlóan belátható. A bizonyításhoz teljes indukciót használunk:

$$n = 1 : \left[\frac{d}{dq}; \left(q - \frac{d}{dq} \right) \right] = I$$

$$\text{Biz. : } \left[\frac{d}{dq}; \left(q - \frac{d}{dq} \right) \right] f = \left(\left[\frac{d}{dq}; q \right] - \left[\frac{d}{dq}; \frac{d}{dq} \right] \right) f = \\ \left[\frac{d}{dq}; q \right] f = \frac{d}{dq}(qf) - q\frac{df}{dq} = f + qf' - qf' = f$$

$$n \Rightarrow n + 1 : \left[\frac{d}{dq}; \left(q - \frac{d}{dq} \right)^{n+1} \right] = \left[\frac{d}{dq}; \left(q - \frac{d}{dq} \right)^n \left(q - \frac{d}{dq} \right) \right] = \\ \left[\frac{d}{dq}; \left(q - \frac{d}{dq} \right)^n \right] \left(q - \frac{d}{dq} \right) + \left(q - \frac{d}{dq} \right)^n \left[\frac{d}{dq}; \left(q - \frac{d}{dq} \right) \right] = \\ n \left(q - \frac{d}{dq} \right)^{n-1} \left(q - \frac{d}{dq} \right) + \left(q - \frac{d}{dq} \right)^n = (n+1) \left(q - \frac{d}{dq} \right)^n$$

a) Az első állítás bizonyításához deriváljunk bele az Hermite-függvény definíciójába:

$$H'_n(q) = \frac{d}{dq} \left(e^{\frac{q^2}{2}} \left(q - \frac{d}{dq} \right)^n e^{-\frac{q^2}{2}} \right) = qH_n(q) + e^{\frac{q^2}{2}} \frac{d}{dq} \left(q - \frac{d}{dq} \right)^n e^{-\frac{q^2}{2}} = \\ = qH_n(q) + e^{\frac{q^2}{2}} \left(\left(q - \frac{d}{dq} \right)^n \frac{d}{dq} e^{-\frac{q^2}{2}} + n \left(q - \frac{d}{dq} \right)^{n-1} e^{-\frac{q^2}{2}} \right) = \\ = qH_n(q) + nH_{n-1}(q) - e^{\frac{q^2}{2}} \left(q - \frac{d}{dq} \right)^n q e^{-\frac{q^2}{2}} = \\ = qH_n(q) + nH_{n-1}(q) + e^{\frac{q^2}{2}} n \left(q - \frac{d}{dq} \right)^{n-1} e^{-\frac{q^2}{2}} - e^{\frac{q^2}{2}} q \left(q - \frac{d}{dq} \right)^n e^{-\frac{q^2}{2}} = \\ = \cancel{qH_n(q)} + nH_{n-1}(q) + nH_{n-1}(q) - \cancel{qH_n(q)} = 2nH_{n-1}(q)$$

Ezzel az első állítást beláttuk. Tekintsük most a másodikat:

$$\begin{aligned}
H_n(q) &= e^{\frac{q^2}{2}} \left(q - \frac{d}{dq} \right)^n e^{-\frac{q^2}{2}} = e^{\frac{q^2}{2}} \left(q - \frac{d}{dq} \right)^{n-1} \left(q - \frac{d}{dq} \right) e^{-\frac{q^2}{2}} = \\
&= e^{\frac{q^2}{2}} \left(q - \frac{d}{dq} \right)^{n-1} \left(q e^{-\frac{q^2}{2}} + q e^{-\frac{q^2}{2}} \right) = 2e^{\frac{q^2}{2}} \left(q - \frac{d}{dq} \right)^{n-1} q e^{-\frac{q^2}{2}} = \\
&= 2e^{\frac{q^2}{2}} \left[q \left(q - \frac{d}{dq} \right)^{n-1} - (n-1) \left(q - \frac{d}{dq} \right)^{n-2} \right] e^{-\frac{q^2}{2}} = \\
&= 2qH_{n-1}(q) - 2(n-1)H_{n-2}(q)
\end{aligned}$$

Átrendezve, illetve eggyel eltolva a sorszámozást megkapjuk a második egyenletet:

$$2qH_n(q) = H_{n+1}(q) + 2nH_{n-1}(q) \quad (2.171)$$

b) A bizonyított két állítás jobb oldalainak összevetéséből kapott egyenletet felírva, ebbe újra belederiválva, majd felhasználva az első állítást, végül átrendezve::

$$H'_n(q) = 2qH_n(q) - H_{n+1}(q) \quad (2.172)$$

$$H''_n(q) = 2H_n(q) + 2qH'_n(q) - H'_{n+1}(q) \quad (2.173)$$

$$H''_n(q) = 2H_n(q) + 2qH'_n(q) - 2(n+1)H_n(q) \quad (2.174)$$

$$H''_n(q) - 2qH'_n(q) + 2nH_n(q) = 0 \quad (2.175)$$

2.16 Megoldás Mivel $x < 0$ -ra $V(x) = \infty$, $\psi(0) = 0$ peremfeltételnek teljesülnie kell. $x > 0$ -ra a Hamilton operátor egy harmonikus oszcillátor Hamiltonijával egyezik meg, így a Schrödinger-egyenletnek megoldása lesz $x > 0$ esetén a harmonikus oszcillátor minden olyan hullámfüggvénye, ami tudja a peremfeltételt. Mivel az Hermite-polinomok tisztán páros vagy tisztán páratlan hatványokból állnak, a harmonikus oszcillátor páratlan sorszámú megoldásai kielégítik a peremfeltételt. A normálásra figyelnünk kell még, ugyanis most a $[0 - \infty)$ közti integrálnak kell egységnyinek lennie. Ez az Hermite-függvények szimmetriája miatt azt jelenti, hogy $N_n/\sqrt{2}$ lesz a megfelelő normálófaktor. Így a Schrödinger egyenlet megoldásai:

$$\psi_k(x) = \begin{cases} \frac{N_{2k+1}}{\sqrt{2}} H_{2k+1} \left(\frac{x}{x_0} \right) e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}, & \text{ha } x > 0 \\ 0, & \text{ha } x < 0 \end{cases} \quad (2.176)$$

$$E_k = \hbar\omega \left(2k + 1 + \frac{1}{2} \right), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.177)$$

A rendszer alapállapota tehát:

$$\psi_0(x) = \begin{cases} \frac{N_1}{\sqrt{2}} H_1 \left(\frac{x}{x_0} \right) e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}, & \text{ha } x > 0 \\ 0, & \text{ha } x < 0 \end{cases} \quad (2.178)$$

$$E_0 = \frac{3}{2} \hbar\omega \quad (2.179)$$

Így az x operátor várható értéke:

$$\begin{aligned}\langle x \rangle_0 &= \int_0^\infty \frac{N_1^2}{2} x H_1 \left(\frac{x}{x_0} \right)^2 e^{-\frac{x^2}{x_0^2}} dx = \int_0^\infty x_0^2 \frac{N_1^2}{2} q H_1(q)^2 e^{-q^2} dq = \\ &= \frac{x_0^2}{4x_0\sqrt{\pi}} \int_0^\infty 4q^3 e^{-q^2} dq = \frac{x_0}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{2} = \sqrt{\frac{\hbar}{4m\omega\pi}}\end{aligned}$$

2.17 Megoldás A Hamilton-operátor felbontható három független harmonikus oszcillátor összegére:

$$H = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 y^2 \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 z^2 \right) \quad (2.180)$$

Keressük a hullámfüggvényt $\psi(x, y, z) = A(x)B(y)C(z)$ alakban, ekkor

$$\begin{aligned}H\psi(x, y, z) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 A(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 A(x) \right) B(y)C(z) + \\ &+ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 B(y)}{\partial y^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 y^2 B(y) \right) A(x)C(z) + \\ &+ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 C(z)}{\partial z^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 z^2 C(z) \right) A(x)B(y) = E\psi(x, y, z)\end{aligned}$$

Elosztva mindkét oldalt $\psi(x, y, z)$ -vel:

$$\begin{aligned}&\frac{1}{B(y)C(z)} \left(-\frac{1}{A(x)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 A(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) + \\ &+ \frac{1}{A(x)C(z)} \left(-\frac{1}{B(y)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 B(y)}{\partial y^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 y^2 \right) + \\ &+ \frac{1}{A(x)B(y)} \left(-\frac{1}{C(z)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 C(z)}{\partial z^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 z^2 \right) = E\end{aligned}$$

Bármely x, y, z értékre ez úgy teljesülhet csak, ha a fenti kifejezés minden zárójelben lévő tagja konstans, innen:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) A(x) = E_x A(x) \quad (2.181)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 y^2 \right) B(y) = E_y B(y) \quad (2.182)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 z^2 \right) C(z) = E_z C(z) \quad (2.183)$$

$$E_x + E_y + E_z = E \quad (2.184)$$

Tehát mindhárom irányban mostmár egy-egy különálló harmonikus oszcillátorral van dolgunk, melynek ismerjük a megoldását. Így

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = N_{n_x} N_{n_y} N_{n_z} H_{n_x} \left(\frac{x}{x_0} \right) H_{n_y} \left(\frac{y}{x_0} \right) H_{n_z} \left(\frac{z}{x_0} \right) e^{-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2x_0^2}} \quad (2.185)$$

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \hbar\omega \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right), \text{ ahol } n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \dots \quad (2.186)$$

Világos, hogy különböző (n_x, n_y, n_z) kombinációk kiadhatják ugyan azt az energiát, ha az összegük azonos. Nézzük meg, hogy hányszorosan degeneráltak tehát az egyes nívók. Legyen $n = n_x + n_y + n_z$ fix. Ekkor adott n_x mellett összesen $n - n_x + 1$ darab olyan (n_y, n_z) pár van, melyek összege $n_y + n_z = n - n_x$. Hogy megkepjük azt n -edik nívó degeneráltságát, ezt kell összegeznünk lehetséges n_x értékekre:

$$\begin{aligned} d_n &= \sum_{n_x=0}^n n - n_x + 1 = (n+1)(n+1) - \sum_{n_x=0}^n n_x = (n+1)^2 - \frac{(n+1)(n+2)}{2} = \\ &= (n+1)^2 - \frac{(n+1)^2}{2} + \frac{n+1}{2} = \frac{(n+1)^2}{2} + \frac{n+1}{2} = \frac{(n+1)(n+2)}{2} \end{aligned}$$

Az első néhány szint esetében:

n	d_n	(n_x, n_y, n_z)
0	1	(0, 0, 0)
1	3	(1, 0, 0) (0, 1, 0) (0, 0, 1)
2	6	(2, 0, 0) (0, 2, 0) (0, 0, 2) (1, 1, 0) (1, 0, 1) (0, 1, 1)

2.18 Megoldás A Hamilton operátor az impulzusban csak négyzetes tagokat tartalmaz, ezt kellene elérnünk a potenciálban is, hogy a problémát visszavezessük az egyszerű kétdimenziós oszcillárra, amely a 2.17. példához hasonlóan egyszerűen megoldhatunk. Ehhez a potenciálban szereplő másodfokú kifejezést kanonikus alakra kell hoznunk:

$$x^2 + \alpha xy + y^2 = (x, y) \begin{pmatrix} 1 & \frac{\alpha}{2} \\ \frac{\alpha}{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (2.187)$$

A mátrix sajátértékei és sajátvektorai:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{2+\alpha}{2}; & \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \lambda_2 &= \frac{2-\alpha}{2}; & \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

(x, y) változókról térjünk át tehát a következő (u, v) változókra:

$$\begin{aligned} u &= \sqrt{\frac{2+\alpha}{2}} \left(\frac{x+y}{\sqrt{2}} \right) = \frac{\sqrt{2+\alpha}}{2} (x+y) \\ v &= \sqrt{\frac{2-\alpha}{2}} \left(\frac{x-y}{\sqrt{2}} \right) = \frac{\sqrt{2-\alpha}}{2} (x-y) \end{aligned}$$

Ekkor $x^2 + \alpha xy + y^2 = u^2 + v^2$. Nézzük hogyan kell átírnunk az impulzust tartalmazó

tagokat u -t és v -t tartalmazókra:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial}{\partial v} = \frac{1}{2}\sqrt{2+\alpha} \frac{\partial}{\partial u} + \frac{1}{2}\sqrt{2-\alpha} \frac{\partial}{\partial v} \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} &= \frac{2+\alpha}{4} \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\sqrt{(2+\alpha)(2-\alpha)}}{2} \frac{\partial}{\partial u} \frac{\partial}{\partial v} + \frac{2+\alpha}{4} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial}{\partial v} = \frac{1}{2}\sqrt{2+\alpha} \frac{\partial}{\partial u} - \frac{1}{2}\sqrt{2-\alpha} \frac{\partial}{\partial v} \\ \frac{\partial^2}{\partial y^2} &= \frac{2+\alpha}{4} \frac{\partial^2}{\partial u^2} - \frac{\sqrt{(2+\alpha)(2-\alpha)}}{2} \frac{\partial}{\partial u} \frac{\partial}{\partial v} + \frac{2+\alpha}{4} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} &= \frac{2+\alpha}{2} \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{2-\alpha}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2}\end{aligned}$$

Tehát a Hamiltoni alakja:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{2+\alpha}{2} \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 u^2 + -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{2-\alpha}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 v^2 \quad (2.188)$$

Ekkor egy $(u, v) \rightarrow (w, z)$ átskálázással, a következőhöz jutunk:

$$w = \sqrt{\frac{2}{2+\alpha}} u \Rightarrow \frac{\partial}{\partial w} = \sqrt{\frac{2+\alpha}{2}} \frac{\partial}{\partial u} \quad (2.189)$$

$$z = \sqrt{\frac{2}{2-\alpha}} v \Rightarrow \frac{\partial}{\partial z} = \sqrt{\frac{2-\alpha}{2}} \frac{\partial}{\partial v} \quad (2.190)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial w^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{2+\alpha}{2} w^2 + -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{2-\alpha}{2} z^2 \quad (2.191)$$

$$(2.192)$$

Bevezetve $\omega_1 = \sqrt{\frac{2+\alpha}{2}}\omega$ illetve $\omega_2 = \sqrt{\frac{2-\alpha}{2}}\omega$ változókat eljuthatunk egy anizotrop kétdimenziós oszcillátor Hamiltonijához:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial w^2} + \frac{1}{2}m\omega_1^2 w^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2}m\omega_2^2 z^2 \quad (2.193)$$

Ennek Schrödinger-egyenletét a 2.17.példához hasonlóan könnyen megoldhatjuk:

$$E_{n_x, n_y} = \hbar\omega_1 \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_2 \left(n_y + \frac{1}{2} \right) \quad (2.194)$$

2.19 Megoldás Vezessük be a $B = \frac{2m}{\hbar^2}C$ illetve az $\alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} |E|}$ mennyiségeket. Ezeket felhasználva a Schrödinger-egyenlet alakja:

$$\psi''(x) + \frac{B}{x} \psi(x) - \alpha^2 \psi(x) = 0 \quad (2.195)$$

Az asszipmtotikus viselkedés:

$$\psi''_a(x) - \alpha^2 \psi_a(x) = 0 \Rightarrow \psi_a(x) = e^{-\alpha x} \quad (2.196)$$

Keressük tehát a megoldást

$$\psi(x) = e^{-\alpha x} u(x) \quad (2.197)$$

alakban! A deriváltak:

$$\psi'(x) = -\alpha e^{-\alpha x} u(x) + e^{-\alpha x} u'(x) \quad (2.198)$$

$$\psi''(x) = \alpha^2 e^{-\alpha x} u(x) - 2\alpha e^{-\alpha x} u'(x) + e^{-\alpha x} u''(x) \quad (2.199)$$

Beírva a Schrödinger-egyenletbe a következő differenciálegyenletet kapjuk $u(x)$ -re:

$$u''(x) - 2\alpha u'(x) + \frac{B}{x} u(x) = 0 \quad (2.200)$$

Keressük $u(x)$ -et polinom alakban, így $u(x)$ és deriváltjai:

$$u(x) = \sum_{r=0}^{\infty} c_r x^{r+s} \quad (2.201)$$

$$u'(x) = \sum_{r=0}^{\infty} c_r (r+s) x^{r+s-1} \quad (2.202)$$

$$u''(x) = \sum_{r=0}^{\infty} c_r (r+s)(r+s-1) x^{r+s-2} = \sum_{r=-1}^{\infty} c_{r-1} (r+s)(r+s+1) x^{r+s-1} \quad (2.203)$$

$$(2.204)$$

Visszaírva a (2.207) egyenletbe a következőket kapjuk:

$$\begin{aligned} r = -1 : & \quad c_0 \cdot s(s-1) = 0 \Rightarrow c_0 = 0 \text{ vagy } s = 0 \text{ vagy } s = 1 \\ r \geq 0 & \quad c_{r+1} (r+s+1)(r+s) - 2\alpha c_r (r+s) + B c_r = 0, \end{aligned}$$

tehát

$$c_{r+1} = \frac{2\alpha(r+s) - B}{(r+s+1)(r+s)} c_r \quad (2.205)$$

Innen azt kapjuk, hogy ha $c_r = 0$, akkor c_{r+k} is az, tehát $c_0 \neq 0$, hisz ekkor az egész függvény 0 lenne. Így vagy $s = 0$ vagy $s = 1$ -nek kell teljesülnie. $s = 0$ esetén $c_1 \cdot 1 \cdot 0 - 2\alpha c_0 \cdot 0 + B c_0 = 0$, tehát $c_0 = 0$ következne. Ez nem lehet, így $s = 1$ -nek kell teljesülnie. Így

$$c_{r+1} = \frac{2\alpha(r+1) - B}{(r+2)(r+1)} c_r \quad (2.206)$$

Ha $r \rightarrow \infty$, akkor $c_{r+1} \approx \frac{2\alpha}{r+2} c_r \approx \frac{2\alpha}{r} c_r$, ahonnan $u_a(x) = e^{2\alpha x}$, mivel

$$e^{2\alpha x} \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(2\alpha x)^r}{r!} \Rightarrow \frac{c_{r+1}}{c_r} = \frac{(2\alpha)^{r+1} r!}{(r+1)! 2\alpha} = \frac{2\alpha}{r+1} \quad (2.207)$$

Innen $x \rightarrow \infty$ esetén $\psi(x) \rightarrow e^{-\alpha x} e^{2\alpha x} = e^{\alpha x}$ szerint divergál, ami nem lehetséges. A megoldásunk csak akkor lehet jó, ha $u(x)$ egy véges fokszámú polinom, ezért léteznie kell olyan B -nek, hogy valamely $n = r_{max} + 1$ -re

$$2\alpha(r_{max} + 1) - B = 2\alpha n - B = 0, \text{ ahol } n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.208)$$

Így

$$\alpha = \frac{B}{2n} = \frac{2mC}{2\hbar^2} \frac{1}{n} = \frac{mC}{\hbar^2} \frac{1}{n} \quad (2.209)$$

Vagyis az energia csak diszkrét nívókat vehet fel:

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{m^2 C^2}{\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{mC^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (2.210)$$

2.20 Megoldás Vezessük be a következő jelöléseket:

$$a_1 = \frac{2m}{\hbar^2} d_1, \quad a_2 = \frac{2m}{\hbar^2} d_2, \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} |E|} \quad (2.211)$$

Az új változókkal a Schrödinger-egyenletet így írhatjuk fel:

$$\phi'' + \frac{a_1}{x} \phi - \frac{a_2}{x^2} \phi - \alpha^2 \phi = 0 \quad (2.212)$$

Az egyenlet aszimptotikus alakja:

$$\phi'' - \alpha^2 \phi = 0 \quad (2.213)$$

melyből következik, hogy a megoldást a $\phi(x) = u_s(x)e^{-\alpha x}$ alakban kereshetjük, ahol:

$$u_s(x) = x^s \sum_{i=0}^{\infty} b_i x^i. \quad (2.214)$$

Világos, hogy így $\lim_{x \rightarrow 0} \psi(x) = 0$, tehát a peremfeltétel teljesül az $x = 0$ -ban. A hullámfüggvény második deriváltját a következőképpen írhatjuk:

$$\phi'' = (u_s'' - 2\alpha u_s' + \alpha^2 u_s) e^{-\alpha x} \quad (2.215)$$

A második deriváltat a (2.212) számú egyenletbe helyettesítve a Schrödinger-egyenletet így írhatjuk:

$$u_s'' - 2\alpha u_s' + \left(\frac{a_1}{x} - \frac{a_2}{x^2}\right) u_s = 0. \quad (2.216)$$

Számoljuk ki a fenti egyenletben szereplő deriváltakat:

$$u_s' = \sum_{i=0}^{\infty} (i+s) b_i x^{i+s-1} = s b_0 x^{s-1} + \sum_{i=0}^{\infty} (i+s+1) b_{i+1} x^{i+s} \quad (2.217)$$

$$\begin{aligned} u_s'' &= \sum_{i=0}^{\infty} (i+s)(i+s-1) b_i x^{i+s-2} = \\ &= s(s-1) b_0 x^{s-2} + s(s+1) b_1 x^{s-1} + \sum_{i=0}^{\infty} (i+s+2)(i+s+1) b_{i+2} x^{i+s} \end{aligned} \quad (2.218)$$

$$\frac{1}{x} u_s = \sum_{i=0}^{\infty} b_i x^{i+s-1} = b_0 x^{s-1} + \sum_{i=0}^{\infty} b_{i+1} x^{i+s} \quad (2.219)$$

$$\frac{1}{x^2} u_s = \sum_{i=0}^{\infty} b_i x^{i+s-2} = b_0 x^{s-2} + b_1 x^{s-1} + \sum_{i=0}^{\infty} b_{i+2} x^{i+s} \quad (2.220)$$

Helyettesítsük be a deriváltakat a (2.216) egyenletbe:

$$(s(s-1) - a_2) b_0 x^{s-1} + (s(s+1)b_1 - 2\alpha s b_0 + a_1 b_0 - a_2 b_1) x^{s-1} \quad (2.221)$$

$$+ \sum_{i=0}^{\infty} ((i+s+2)(i+s+1)b_{i+2} - 2\alpha(i+s+1)b_{i+1} + a_1 b_{i+1} - a_2 b_{i+2}) x^{i+s} = 0$$

Nyilvánvalóan az egyenlet bal oldalán álló polinom minden együtthatójának nullával kell egyenlőnek lennie:

$$0 = (s(s-1) - a_2) b_0 \quad (2.222)$$

$$b_1 = \frac{a_1 - 2\alpha s}{s(s+1) - a_2} b_0 \quad (2.223)$$

$$b_{i+2} = \frac{a_1 - 2\alpha(i+s+1)}{(i+s+2)(i+s+1) - a_2} b_{i+1} \quad (2.224)$$

A $b_0 = 0$ választás $u(x)$ azonosan nulla megoldást eredményezne. Ha az s kitevő negatív, akkor az $u(x)$ függvény irreguláris az $x = 0$ -ban, tehát $s = \frac{1}{2} + \sqrt{a_2 + \frac{1}{4}}$. Az $u(x)$ polinomnak véges fokszámú polinomnak kell lennie, ezért

$$a_1 = 2\alpha(n+s-1). \quad (2.225)$$

Tehát az energia:

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{8m} \frac{a_1^2}{(n+s-1)^2} = -\frac{m}{2\hbar^2} \frac{d_1^2}{\left(n - \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} d_2 + \frac{1}{4}}\right)^2} \quad (2.226)$$

Az eredmény $d_2 = 0$ esetén megegyezik a 2.210 egyenlettel.

2.21 Megoldás Mivel a betöltési szám reprezentáció bázisát épp a Hermite-függvények adják $|n\rangle$ -nek koordináta reprezentációban $N_n H_n(q) e^{-\frac{q^2}{2}}$ felel meg $q = \frac{x}{x_0}$ és $N_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! x_0 \sqrt{\pi}}}$ választás mellett. Így

$$x|n\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}} (a^\dagger + a) |n\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{n+1} |n+1\rangle + \sqrt{n} |n-1\rangle \right) \quad (2.227)$$

Ezt koordinátereprzentációba írva:

$$x N_n H_n(q) e^{-\frac{q^2}{2}} = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{n+1} N_{n+1} H_{n+1}(q) e^{-\frac{q^2}{2}} + \sqrt{n} N_{n-1} H_{n-1}(q) e^{-\frac{q^2}{2}} \right) \quad (2.228)$$

$$\frac{x}{2^{\frac{n}{2}} \sqrt{n!} \sqrt{x_0 \pi^{\frac{1}{4}}}} H_n(q) = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \left(\frac{\sqrt{n+1}}{2^{\frac{n+1}{2}} \sqrt{(n+1)!} \sqrt{x_0 \pi^{\frac{1}{4}}}} H_{n+1}(q) + \frac{\sqrt{n}}{2^{\frac{n-1}{2}} \sqrt{(n-1)!} \sqrt{x_0 \pi^{\frac{1}{4}}}} N_{n-1} H_{n-1}(q) \right) \quad (2.229)$$

$$\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{n}} q H_n(q) = \frac{1}{\sqrt{2n}} H_{n+1}(q) + \sqrt{2n} H_{n-1}(q) \quad (2.230)$$

$$q H_n(q) = n H_{n-1}(q) + \frac{1}{2} H_{n+1}(q) \quad (2.231)$$

2.22 Megoldás A 3.7 megoldás során meghatározzuk $\langle x^2 \rangle_n$ és $\langle p^2 \rangle_n$ értékét:

$$\langle x^2 \rangle_n = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \langle p^2 \rangle_n = m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (2.232)$$

Így tehát

$$\langle V \rangle_n = \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{\hbar\omega}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \langle T \rangle_n = \frac{\hbar^2}{2m} m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{\hbar\omega}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (2.233)$$

Mivel $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$, teljesül, hogy $\langle V \rangle_n = \langle T \rangle_n = \frac{E_n}{2}$.

2.23 Megoldás Világos, hogy a A_{ij} Hamilton-operátorral vett kommutátorait kell kiszámolnunk. Az xx és yy elemek nyilvánvalóan kommutálnak a Hamiltonival, tehát elég csak az xy elemet megvizsgálnunk a mátrix szimmetrikussága miatt:

$$\begin{aligned} [H; A_{xy}] &= \left[\frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2 y^2}{2}; \frac{p_x p_y}{2m} + \frac{m\omega^2 xy}{2} \right] \\ &= \left[\frac{p_x^2}{2m}; \frac{m\omega^2 xy}{2} \right] + \left[\frac{p_y^2}{2m}; \frac{m\omega^2 xy}{2} \right] + \left[\frac{m\omega^2 x^2}{2}; \frac{p_x p_y}{2m} \right] + \left[\frac{m\omega^2 y^2}{2}; \frac{p_x p_y}{2m} \right] = \\ &= \frac{\hbar\omega^2}{2i} p_x y + \frac{\hbar\omega^2}{2i} p_y x - \frac{\hbar\omega^2}{2i} x p_y - \frac{\hbar\omega^2}{2i} y p_x = 0 \end{aligned}$$

Megjegyezzük, hogy a mátrix nyoma épp az energia, determinánsa pedig az impulzusmomentum operátor. Ha A_{ij} minden eleme megmaradó, akkor nyilván ezek kombinációjából előállított nyom és determináns is.

2.24 Megoldás a)

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle \quad a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (2.234)$$

Innen

$$a|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n a|n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_{n+1} \sqrt{n+1} |n\rangle = \alpha \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle \quad (2.235)$$

Tehát

$$c_{n+1} = \frac{\alpha c_n}{\sqrt{n+1}} = c_0 \frac{\alpha^{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}} \Rightarrow |\alpha\rangle = c_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (2.236)$$

A normálásból megkaphatjuk c_0 értékét:

$$1 = \langle \alpha | \alpha \rangle = |c_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(|\alpha|^2)^n}{n!} = |c_0|^2 e^{|\alpha|^2} \Rightarrow c_0 = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \quad (2.237)$$

Tehát α alakja a következő:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n (a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2} + \alpha a^\dagger} |0\rangle \quad (2.238)$$

b) Az $|\alpha\rangle$ állapot időfejlődése a következő alakú:

$$\begin{aligned} |\alpha, t\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} |\alpha, 0\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} |n\rangle = \\ &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t} |n\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega t} a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = \\ &= e^{-i\frac{\omega t}{2}} |\alpha e^{-i\omega t}\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}} |\alpha(t)\rangle \end{aligned}$$

Vagyis egy $e^{-i\frac{\omega t}{2}}$ fázisfaktort leszámítva valóban azt kaptuk, hogy $\alpha(t) = \alpha e^{-i\omega t}$ választással leírható a koherens állapot időfejlődése, illetve hogy koherens állapot koherens marad az időfejlődése során.

c)

$$\bar{E} = \langle \alpha | \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) | \alpha \rangle = \hbar\omega \left(|a| |\alpha\rangle|^2 + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(|\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right) \quad (2.239)$$

d)

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 = (\langle x^2 \rangle_\alpha - \langle x \rangle_\alpha^2) = (\langle p^2 \rangle_\alpha - \langle p \rangle_\alpha^2) \quad (2.240)$$

A fenti kifejezésben szereplő tagokat kell kiszámolnunk:

$$\langle x \rangle_\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \alpha | a^\dagger + a | \alpha \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha^* + \alpha) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} 2\Re\alpha \quad (2.241)$$

$$\langle p \rangle_\alpha = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \langle \alpha | a^\dagger - a | \alpha \rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\alpha^* - \alpha) = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} 2\Im\alpha \quad (2.242)$$

Felhasználva, hogy $[a, a^\dagger] = I$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_\alpha &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \alpha | a^{\dagger 2} + a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a | \alpha \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \alpha | a^{\dagger 2} + a^2 + 2a^\dagger a + 1 | \alpha \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} (\alpha^{*2} + \alpha^2 + 2|\alpha|^2 + 1) = \frac{\hbar}{2m\omega} (1 + 4(\Re\alpha)^2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle_\alpha &= -\frac{m\hbar\omega}{2} \langle \alpha | a^{\dagger 2} + a^2 - aa^\dagger - a^\dagger a | \alpha \rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2} \langle \alpha | a^{\dagger 2} + a^2 - 2a^\dagger a - 1 | \alpha \rangle = \\ &= -\frac{m\hbar\omega}{2} (\alpha^{*2} + \alpha^2 - 2|\alpha|^2 - 1) = \frac{m\hbar\omega}{2} (1 + 4(\Im\alpha)^2) \end{aligned}$$

Ezeket behelyettesítve:

$$\begin{aligned} (\Delta x)^2 (\Delta p)^2 &= (\langle x^2 \rangle_\alpha - \langle x \rangle_\alpha^2) = (\langle p^2 \rangle_\alpha - \langle p \rangle_\alpha^2) = \\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega} (1 + 4(\Re\alpha)^2) - \frac{\hbar}{2m\omega} 4(\Re\alpha)^2 \right) \left(\frac{m\hbar\omega}{2} (1 + 4(\Im\alpha)^2) - \frac{m\hbar\omega}{2} 4(\Im\alpha)^2 \right) = \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \frac{m\hbar\omega}{2} = \frac{\hbar^2}{4} \end{aligned}$$

Tehát $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$, vagyis a Heisenberg határozatlansági reláció egyenlőtlensége éles, a hely- és impulzusbizonytalanság szorzata minimális.

e) $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ illetve $N = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}$ jelölést bevezetve, illetve felhasználva, hogy koordináta-reprezentációban $|0\rangle = Ne^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$, $|\alpha(t)\rangle$ alakja koordináta-reprezentációban a következő:

$$|\alpha(t)\rangle = e^{-\frac{|\alpha(t)|^2}{2} + \alpha(t)a^\dagger} |0\rangle = e^{-\frac{|\alpha(t)|^2}{2}} e^{\frac{\alpha(t)}{x_0\sqrt{2}}(x - \frac{i}{m\omega}p)} Ne^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} \quad (2.243)$$

Vezessük be a $q = x/x_0 - t$ változót, és használjuk fel a 1.3. feladatban szereplő Baker-Campbell-Hausdorff formulát:

$$\begin{aligned} |\alpha(t)\rangle &= Ne^{-\frac{|\alpha(t)|^2}{2}} e^{\left(\frac{\alpha(t)}{\sqrt{2}}q - \frac{\alpha(t)}{\sqrt{2}}\frac{d}{dq}\right)} e^{-\frac{q^2}{2}} = Ne^{-\frac{|\alpha(t)|^2}{2}} Ne^{-\frac{\alpha(t)^2}{4}} [q, -\frac{d}{dq}] e^{\frac{\alpha(t)q}{\sqrt{2}}} e^{-\frac{\alpha(t)}{\sqrt{2}}\frac{d}{dq}} e^{-\frac{q^2}{2}} = \\ &= Ne^{-\frac{|\alpha(t)|^2}{2}} Ne^{-\frac{\alpha(t)^2}{4}} e^{\frac{\alpha(t)q}{\sqrt{2}}} e^{-\frac{\alpha(t)}{\sqrt{2}}\frac{d}{dq}} e^{-\frac{q^2}{2}} \end{aligned}$$

Tudjuk, hogy mivel az eltolások generátora $e^{a\frac{d}{dq}}f(q) = f(q-a)$, az utolsó két tagot könnyen egyszerűsíthetjük. A levezetés végén pedig felhasználjuk a (2.241) és (2.242) egyenleteket.

$$\begin{aligned} |\alpha(t)\rangle &= Ne^{-\frac{|\alpha(t)|^2}{2}} e^{-\frac{\alpha(t)^2}{4}} e^{\frac{\alpha(t)q}{\sqrt{2}}} e^{-\frac{\left(q - \frac{\alpha(t)}{\sqrt{2}}\right)^2}{2}} = Ne^{-\frac{|\alpha(t)|^2}{2}} e^{-\frac{\alpha(t)^2}{2}} e^{\sqrt{2}\alpha(t)q} e^{-\frac{q^2}{2}} = \\ &= Ne^{-\frac{1}{2}\left(q^2 + (\Re\alpha(t))^2 + (\Im\alpha(t))^2 + (\Re\alpha(t))^2 - (\Im\alpha(t))^2 + 2i\Re\alpha(t)\Im\alpha(t) - 2\sqrt{2}\Re\alpha(t)q - i2\sqrt{2}\Im\alpha(t)q\right)} = \\ &= Ne^{-\frac{1}{2}\left(q - \sqrt{2}\Re\alpha(t)\right)^2 + i\Re\alpha(t)\Im\alpha(t) + i\sqrt{2}\Im\alpha(t)q} = Ne^{-\frac{1}{2}\left(q - \frac{\langle x \rangle}{x_0}\right)^2 + i\frac{\langle p \rangle}{\sqrt{m\hbar\omega}}q + i\frac{\langle x \rangle \langle p \rangle}{\hbar}} = \\ &= Ne^{-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2x_0^2} + i\frac{\langle p \rangle}{\hbar}x + i\frac{\langle x \rangle \langle p \rangle}{\hbar}} \sim Ne^{-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2x_0^2} + i\frac{\langle p \rangle}{\hbar}x} \end{aligned}$$

Az utolsó tag csak egy konstans fázis, amit nyugodtan eldobhatunk, ekkor az $|\alpha(t)\rangle$ -val ekvivalens hullámfüggvényt kapunk, erre utal a \sim jel. A teljes időfüggő koherens állapot így:

$$|\alpha, t\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}} |\alpha(t)\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2x_0^2} + i\left(\frac{\langle p \rangle}{\hbar}x - \frac{\omega t}{2}\right)} \quad (2.244)$$

A végeredmény egy $v = \frac{\omega}{\frac{\hbar}{\langle p \rangle}} = \frac{\hbar\omega}{2\langle p \rangle}$ sebességgel menő x_0 szórású Gauss-függvény, ami az időfejlődés során látható módon nem folyik szét!

f) Tegyük fel, hogy van egy $|\beta\rangle$ vektor, hogy $a^\dagger|\beta\rangle = \beta|\beta\rangle$

$$a^\dagger(\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \dots) = (0, \beta_0, \sqrt{2}\beta_1, \sqrt{3}\beta_2, \dots) = \beta(\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \dots) \quad (2.245)$$

Ezeket összevetve:

$$\begin{aligned} \beta\beta_0 &= 0 \\ \beta\beta_1 &= \beta_0 \\ \beta\beta_2 &= \sqrt{2}\beta_1 \\ &\vdots \\ \beta\beta_i &= \sqrt{i}\beta_{i-1} \end{aligned}$$

Így mivel $\beta_0 = 0$, az összes $\beta_i = 0$, tehát a nullvektort kapjuk eredményül.

3. fejezet

Reprezentációk és kvantummechanikai képek

3.1. Elmélet

3.1.1. Diszkrét reprezentációk

Legyen \hat{A} egy diszkrét spektrummal rendelkező hermitikus operátor a \mathcal{H} Hilbert téren,

$$\hat{A} |n\rangle^A = \lambda_n^A |n\rangle^A \quad (n \in \mathbb{N}) . \quad (3.1)$$

Valamely $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ állapotra $\exists! a_n^\psi = {}^A \langle n | \Psi \rangle \in \mathbb{C} \quad (n \in \mathbb{N})$,

$$|\psi\rangle = \underbrace{\sum_n |n\rangle^A}_{\hat{I}} {}^A \langle n | \Psi \rangle = \sum_n a_n^\psi |n\rangle^A . \quad (3.2)$$

Ekkor az $\underline{a}^\psi = \{a_n^\psi\} \in \ell^2$ vektort a $|\psi\rangle$ állapot diszkrét A -ábrázolásának nevezzük. A diszkrét ábrázolás tehát az

$$R_A : \mathcal{H} \rightarrow \ell^2 , \quad R_A |\psi\rangle = \underline{a}^\psi , \quad (3.3)$$

unitér leképezés, hiszen

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \sum_n (a_n^\varphi)^* a_n^\psi = (\underline{a}^\varphi)^\dagger \underline{a}^\psi . \quad (3.4)$$

Az $\hat{O} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ operátor ábrázolását a következőképpen definiáljuk:

$$\hat{O} |n\rangle^A = \sum_m |m\rangle^A O_{mn}^A \implies \hat{O} |\psi\rangle = \sum_{m,n} |m\rangle^A O_{mn}^A a_n^\psi , \quad (3.5)$$

tehát az $\hat{O} |\psi\rangle$ állapot A -ábrázolása az $\underline{Q}^A \underline{a}^\psi = \{\sum_n O_{mn}^A a_n^\psi\} \in \ell^2$ vektor, ezért az \underline{Q}^A (végtelen) mátrixot az \hat{O} operátor A -ábrázolásának hívjuk.

Hermitikus operátor ábrázolása önadjungált mátrix:

$$O_{mn}^A = {}^A \langle m | \hat{O} | n \rangle^A = \left({}^A \langle n | \hat{O} | m \rangle^A \right)^* = (O_{nm}^A)^* . \quad (3.6)$$

Az operátorok ábrázolása az összeadásra és szorzásra nézve homomorfizmus:

$${}^A \langle m | \hat{O}_1 + \hat{O}_2 | n \rangle^A = {}^A \langle m | \hat{O}_1 | n \rangle^A + {}^A \langle m | \hat{O}_2 | n \rangle^A = O_{1,mn}^A + O_{2,mn}^A , \quad (3.7)$$

$${}^A \langle m | \hat{O}_1 \hat{O}_2 | n \rangle^A = \sum_k {}^A \langle m | \hat{O}_1 | k \rangle^A {}^A \langle k | \hat{O}_2 | n \rangle^A = \sum_k O_{1,mk}^A O_{2,kn}^A = \left(\underline{\underline{O}}_1^A \underline{\underline{O}}_2^A \right)_{mn} . \quad (3.8)$$

Tekintsünk két reprezentációt, melyeket az \hat{A} és \hat{B} diszkrét spektrumú hermitikus operátorok generálnak. Belátjuk, hogy a két reprezentáció *unitérekvivalens*, azaz az $U = R_A R_B^{-1} : \ell^2 \rightarrow \ell^2$ leképezés unitér. Mivel bármely $|\psi\rangle$ állapotra,

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n^\psi |n\rangle^A = \sum_n b_n^\psi |n\rangle^B , \quad (3.9)$$

$$a_m^\psi = \sum_n \underbrace{{}^A \langle m | n \rangle^B}_{U_{mn}} b_n^\psi \implies \underline{\underline{a}}^\psi = \underline{\underline{U}} \underline{\underline{b}}^\psi \iff R_A = U R_B , \quad (3.10)$$

ahol $\underline{\underline{U}}$ a két reprezentáció közötti áttérés mátrixa. A definícióból következik, hogy

$$|n\rangle^B = \sum_m |m\rangle^A U_{mn} , \quad (3.11)$$

és a bázisfüggvények ortonormalitásából,

$$\underbrace{{}^B \langle m | n \rangle^B}_{\delta_{mn}} = \sum_{l,k} U_{ml}^* \underbrace{{}^A \langle l | k \rangle^A}_{\delta_{lk}} U_{nk} = \sum_k U_{nk} U_{mk}^* \implies \underline{\underline{U}} \underline{\underline{U}}^\dagger = \underline{\underline{I}} = \underline{\underline{U}}^\dagger \underline{\underline{U}} . \quad (3.12)$$

Innen az is következik, hogy az operátorok mátrixelemei bármely reprezentációban kiszámítható:

$$\langle \varphi | \hat{O} | \psi \rangle = (\underline{\underline{a}}^\varphi)^\dagger \underline{\underline{O}}^A \underline{\underline{a}}^\psi = (\underline{\underline{a}}^\varphi)^\dagger \underline{\underline{U}}^\dagger \underline{\underline{U}} \underline{\underline{O}}^A \underline{\underline{U}} \underline{\underline{U}}^\dagger \underline{\underline{a}}^\psi = (\underline{\underline{b}}^\varphi)^\dagger \underline{\underline{O}}^B \underline{\underline{b}}^\psi . \quad (3.13)$$

Az operátorok ilyen diszkrét reprezentációjával tulajdonképpen végtelen mátrixokat kapunk, az ezekkel felépített kvantummechanika Werner Heisenberg nevéhez fűződik, és gyakran hívják ezt a tárgyalásmódot mátrixmechanikának.

3.1. Példa *Diszkrét reprezentáció bázisául választhatjuk például a harmonikus oszcillátor Hamilton-operátorának sajátbázisát $(|n\rangle)$:*

$$\hat{H} |n\rangle = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 \right) |n\rangle = \hbar \omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle , \quad (3.14)$$

ahol bevezettük a (2.54) és (2.55) képletekben szereplő harmonikus oszcillátor keltő és eltüntető operátorokat:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \hat{p} \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \hat{p} \quad (3.15)$$

mely természetesen éppen a hullámfüggvénynek felel meg koordináta reprezentációban. A bázis ortonormáltsága a (3.22) egyenlet alapján:

$$\langle \delta_\lambda | \delta_{\lambda'} \rangle = \int dx \delta(x - \lambda) \delta(x - \lambda') = \delta(\lambda - \lambda') \quad (3.20)$$

Mint ahogy a (2.21) egyenletben megmutattuk, az impulzus operátort a $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ reprezentálja, melynek approximatív sajátfüggvényei az 1.14. példában szereplő egyre szélesedő Gauss függvények, melyek (ha a normálástól eltekintünk) síkhullámokhoz tartanak. A többi dinamikai mennyiséget előállíthatjuk a koordinátából és az impulzusból.

3.1.3. Impulzus reprezentáció

Impulzus reprezentációban válasszuk a koordinátával való szorzás operátorát \hat{p} -nek: $\hat{p} = p$. Ekkor a koordináta reprezentációhoz hasonlóan

$$|\Psi\rangle = \int dp |\delta_p\rangle \underbrace{\langle \delta_p | \Psi \rangle}_{\psi(p)} = \int dp \psi(p) |\delta_p\rangle, \quad (3.21)$$

ahol $\psi(p) \in L^2$ függvény a hullámfüggvény alakja impulzus reprezentációban. A bázis ortonormáltsága itt is:

$$\langle \delta_\lambda | \delta_{\lambda'} \rangle = \int dp \delta(p - \lambda) \delta(p - \lambda') = \delta(\lambda - \lambda') \quad (3.22)$$

A koordináta operátornak $\hat{x} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}$ -t kell választanunk, hogy konzisztensek legyünk a Heisenberg felcserélési relációkkal, ld. (2.1.2) egyenlet:

$$[\hat{p}, \hat{x}] \Psi(p, t) = -\frac{\hbar}{i} \left(p \frac{\partial}{\partial p} \Psi(p, t) - \frac{\partial}{\partial p} (p \Psi(p, t)) \right) = \frac{\hbar}{i} \Psi(p, t), \quad (3.23)$$

Az 1.14. példa után említettük, hogy a koordináta és az impulzus operátorok egymás Fourier-transzformáltjai. Először is lássuk be ezt koordináta és impulzus reprezentációt használva:

$$\frac{d\Psi(x)}{dx} = \frac{d}{dx} \mathcal{F}^{-1} \mathcal{F} \Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\frac{d}{dx} e^{\frac{i}{\hbar} px}}_{\rightarrow \frac{i}{\hbar} p e^{\frac{i}{\hbar} px}} (\mathcal{F}\Psi)_{(p)} dp = \frac{i}{\hbar} \mathcal{F}^{-1} \left(p \cdot (\mathcal{F}\Psi)_{(p)} \right) \quad (3.24)$$

Vagyis

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \Psi(x) = \mathcal{F}^{-1} p \cdot \mathcal{F} \Psi(x) \Rightarrow \mathcal{F} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \mathcal{F}^{-1} = p. \quad (3.25)$$

Azaz az impulzus operátor koordináta reprezentációjának Fourier-transzformáltja épp az impulzus operátor impulzus reprezentációjával egyezik meg, ami impulzustérben az impulzus koordinátával való szorzás. Az is világos, hogy egy $|\Psi\rangle$ állapot koordináta és impulzus reprezentációja között a Fourier-transzformálás adja az átjárást: Ha $|\Psi\rangle_{coord} = \psi(x)$, akkor $|\Psi\rangle_{imp} = \varphi(p) = \mathcal{F}\psi(x)$.

3.1.4. A Heisenberg-féle határozatlansági reláció

Koordináta-impulzus

A Heisenberg-féle határozatlansági reláció egyike a kvantumvilág klasszikus gondolkodással legnehezebben érthető tulajdonságainak, következményei pedig igen szerteágazóak.

Vegyünk egy olyan $|\Psi\rangle$ állapotot, melyre $\langle\Psi|\hat{x}|\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{p}|\Psi\rangle = 0$. Ha ez nem teljesül, akkor toljuk el a koordinátát, és tekintsük \hat{x} helyett az $\hat{x} - x_0$ operátort, ahol $x_0 = \langle\Psi|\hat{x}|\Psi\rangle$. Járjunk el hasonlóan \hat{p} -vel, így a fenti kritérium mindig teljesíthető. Tekintsük koordináta és impulzus térben is az állapot szórásnégyzetét:

$$\sigma_x^2 = \langle\hat{x}^2\rangle = \int x^2|\psi(x)|^2 dx \quad \sigma_p^2 = \langle\hat{p}^2\rangle = \int p^2|\varphi(p)|^2 dp \quad (3.26)$$

$$\sigma_x^2\sigma_p^2 = \langle x\psi|x\psi\rangle\langle p\varphi|p\varphi\rangle = \langle x\psi|x\psi\rangle\left\langle\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx}\left|\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx}\right.\right\rangle^{(CSB)} \geq \quad (3.27)$$

$$\geq \left|\left\langle x\psi\left|\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx}\right.\right\rangle\right|^2 \geq \left(\Im\left(\left\langle x\psi\left|\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx}\right.\right\rangle\right)\right)^2 = \left(\frac{\langle x\psi|\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx}\rangle - \langle\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx}|x\psi\rangle}{2i}\right)^2 = \quad (3.28)$$

$$\left(\frac{\langle\psi|x\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}|\psi\rangle - \langle\psi|\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}x|\psi\rangle}{2i}\right)^2 = \left(\frac{\langle\psi|[x,\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}]|\psi\rangle}{2i}\right)^2 = \left(\frac{i\hbar\langle\psi|\psi\rangle}{2i}\right)^2 \quad (3.29)$$

$$(3.30)$$

$$\sigma_x\sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (3.31)$$

Ahol az utolsó egyenlet a koordinátára és impulzusra vonatkozó Heisenberg-féle határozatlansági reláció. Világos, hogy ha \hat{x} és \hat{p} helyett tetszőleges \hat{A} és \hat{B} operátor szórására vagyunk kíváncsiak, akkor az első sor harmadik kifejezésébe $x\cdot$ és $\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ helyére \hat{A} és \hat{B} operátort írva a számolás a hamadik sor második képletéig végigvihető, ahonnan:

$$\sigma_{\hat{A}}^2\sigma_{\hat{B}}^2 \geq \left(\frac{\langle\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\rangle}{2i}\right)^2 \quad (3.32)$$

A (3.31) egyenletet összevetve az (3.26) egyenletekkel látható, valamely $\psi(x)$ függvény és Fourier-transzformáltjának karakterisztikus szélessége összefüg egymással: valós térben szűk függvények hullámszám térben szélesek és fordítva. Tekinthejtük példának a Gauss-függvényt:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} \quad \varphi(p) = \sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}}e^{-\frac{p^2\sigma^2}{\hbar^2}} \quad (3.33)$$

Ezen látszik, hogy a határozatlansági relációban szereplő egyenlőtlenség erre éles, vagyis ez egy olyan hullámfüggvény, melyre a határozatlanság minimális, az ilyen állapotokat koherens állapotnak nevezzük, ld. 2.24. feladat. Ha a függvények fizikai jelentését is vizsgáljuk, akkor pedig azzal szembesülünk, hogy egy részecske helye és impulzusa nem

lehet egyidejűleg tetszőlegesen meghatározott¹. Ez merőben új a klasszikus világhoz képest, hiszen ott akár a Newton-, akár a Hamilton-egyenletek megoldásához szükségünk van a kezdő hely és impulzus értékére a mozgásegyenletek megoldásához, és egy részecske pályájának meghatározásához. Kvantummechanikában ezt a kettőt nem ismerhetjük egyszerre tetszőleges pontossággal, illetve nincs értelme a pálya fogalmának sem, hiszen egy részecskéről a hullámfüggvénye alapján csak annyit tudunk megmondani, hogy hol, épp milyen valószínűséggel van.

Természetesen lehet a hullámfüggvény egy időpillanatban tetszőlegesen szűk (kis szórású), azonban az állapot az idő múlásával szétfolyik, hacsak a hullámfüggvény nem épp a Hamilton-operátor sajátállapota. Nézzük meg ezt egy koherens állapotból idított szabad részecskére (A levezetés megtalálható a 3.2 megoldásban):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t, x)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(t, x)}{\partial x^2} \quad \Psi(0, x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma_0^2}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma_0^2}} \quad (3.34)$$

$$\Psi(t, x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m}}} e^{-\frac{x^2}{4(\sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m})}} \quad (3.35)$$

Vagyis az időfüggő Schrödinger-egyenleg megoldása egy Gauss-hullámcsomag $\sigma^2(t) = \sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m}$ paraméterrel, azaz az idő múlásával a hullámcsomag egyre jobban szétfolyik.

3.3. Megjegyzés A (3.34) szabad Schrödinger-egyenletből $\tau = it$ helyettesítéssel egy diffúziós egyenlethez jutunk. Így nem meglepő, hogy eredményül egy it -vel lineárisan növvő szórásnégyzetet kapunk.

Impulzusmomentum

Korábban láttuk, hogy az impulzus a téreltolások generátora, és operátora a térkoordinátáival Fourier-transzformált kapcsolatban van, ami a Heisenberg-féle kommutációs relációkon keresztül a Heisenberg határozatlansági relációhoz vezetett. Joggal vetődik fel a kérdés, hogy a φ azimut szög, és ennek eltolását (a z tengely körüli forgatásokat) generáló L_z között nem kellene-e hasonló kapcsolatnak lennie? A naiv hozzáállás alapján kellene, hiszen pl. (a 4.1 megoldás alapján) $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$ is írható, így az analógia még világosabb. Nagy különbség azonban, hogy míg a koordináta a teljes számegyenes (\mathbb{R}) van értelmezve, addig a φ azimut szög csak a $[0, 2\pi]$ intervallumon ráadásul periodikus peremfeltétellel, azaz topológiailag itt számegyenes (\mathbb{R}) helyett az egységkörvonalról (S^1) beszélhetünk. Így a Fourier transzformálás is csak a $[0, 2\pi]$ intervallumon történik, ráadásul a periodicitás miatt diszkrét Fourier spektrumot kapunk csak (tekinthetjük ezt is annak okának, hogy \hat{L}_z mindig kvantált). Az is világos, hogy teljesen meghatározott L_z mellett a szögnek maximális a határozatlansága, azaz eloszlása egyenletes a $[0, 2\pi]$ -n. Tehát a szórása maximum $\Delta\varphi_{max} = \frac{\pi}{\sqrt{3}}$ lehet, szemben a koordináta és az impulzus

¹Természetesen nem tudjuk a két mennyiséget egyidejűleg mérni, sőt az impulzust nincs értelme közvetlenül a koordináta után sem mérni, hiszen a hely mérés már befolyásolja a részecske állapotát (beugrási axióma), így az impulzus mérés eredménye nem azonos azzal, mintha azt a helymérés előtt végeztünk volna és vice versa. A fenti mondat alatt azt értjük, hogy sok azonosan preparált rendszert véve -ezek felén koordináta, másik felén impulzus mérést végrehajtva- a kapott statisztikák szórásának szorzata nem lehet kisebb $\frac{\hbar}{2}$ -nél.

esetével, ahol a szórás tetszőlegesen nagyra nőhet. Ebben az esetben $\Delta L_z = 0$, azaz $\Delta L_z \Delta \varphi = 0$. Kis szögbizonytalanság esetén a bizonytalanságok szorzatának alsó korlátja tart $\Delta L_z \Delta \varphi = \frac{\hbar}{2}$ -höz, köztes bizonytalanságokra interpolál az alsó korlát 0 és $\frac{\hbar}{2}$ közt. A téma mélyeb kifejtése megtalálható [?]-ben.

Energia-idő

Mivel az időeltolás infinitezimális generátora az energia, az impulzusmomentummal kapcsolatos érvelés elején felvetett kérdés itt is jogos: Vajon létezik-e a koordináta és az impulzus esetében látott határozatlansági reláció az energia és az idő között? Ehhez szükségünk lenne egy „idő” operátorra, azonban egyrészt megmutatható, hogy ilyen konzisztensen nem lehet bevezetni, másrészt az axiómák között szerepel, hogy dinamikai mennyiségekhez rendelünk operátorokat, az idő pedig nem az, csak egy paraméter. Különböző rendszerek állapotai közti átmenetek vizsgálatokor kibocsátott fotonokat mérve azonban mégis van értelme a kibocsátott jel időbeli és frekvenciabeli eloszlásáról beszélni, melyek, mivel egymás Fourier-transzformáltjai, természetesen módon tudniuk kell a Heisenberg-határozatlanságot. Nézzük meg, mi történik, ha a (3.32) egyenletbe B helyére a Hamilton-operátort tesszük:

$$\sigma_A^2 \sigma_H^2 \geq \left(\frac{\langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle}{2i} \right)^2 = \left(\frac{-i\hbar \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle}{2\hbar} \right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} \right)^2 \quad (3.36)$$

Gyököt vonva, és bevezetve a $\tau_A = \frac{\sigma_A}{\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt}}$ időskálát, és a $\Delta E = \sigma_H$ jelölést a következőt kapjuk:

$$\tau_A \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \quad (3.37)$$

Ahol tehát τ_A az a karakterisztikus idő, ami alatt egy A dinamikai mennyiség átlaga egy szórásnyit változik.

3.1.5. Kvantummechanikai képek

A különböző kvantummechanikai képeket aszerint osztályozzuk, hogy a fizikai (dinamikai) mennyiségek időfüggését a Hilbert tér állapotainak vagy az operátorok, ill. mindkettő időfejlődésén keresztül írjuk le.

Schrödinger-kép

Az alapvető dinamikai operátorok (\hat{x}, \hat{p}, \dots) időtől függetlenek,

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0, \quad (3.38)$$

és az időfüggést az állapotfüggvény $\Psi(t)$ hordozza az

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi(t)\rangle \quad (3.39)$$

állapotegyenlet révén, amelynek megoldása a $t = t_0$ kezdőfeltétel mellett egyértelmű. Célszerű bevezetni az $\hat{U}(t, t_0)$ időfejllesztő operátort,

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle, \quad (3.40)$$

ahol

$$i\hbar \frac{d\hat{U}(t, t_0)}{dt} = \hat{H}\hat{U}(t, t_0), \quad (3.41)$$

és

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}. \quad (3.42)$$

Amennyiben \hat{H} nem függ az időtől, $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$, az időfejllesztő operátor alakja,

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} \implies |\Psi(t)\rangle = e^{i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}|\Psi(t_0)\rangle. \quad (3.43)$$

Az időfejllesztő operátor unitér,

$$\hat{U}(t, t_0)^\dagger = e^{i\hat{H}(t_0-t)/\hbar} = \hat{U}(t_0, t) \implies \hat{U}(t, t_0)^\dagger \hat{U}(t, t_0) = \hat{1}. \quad (3.44)$$

Egy dinamikai mennyiség (mátrixelem) időfejlődése,

$$\mathcal{A}(t) = \langle \Psi_1(t) | \hat{A} | \Psi_2(t) \rangle = \langle \Psi_1(t_0) | \hat{U}(t_0, t)^\dagger \hat{A} \hat{U}(t_0, t) | \Psi_2(t_0) \rangle, \quad (3.45)$$

ill. felírhatjuk a következő dinamikai egyenletet:

$$\frac{d\mathcal{A}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \Psi_1(t) \left| \left[\hat{A}, \hat{H} \right] \right| \Psi_2(t) \right\rangle. \quad (3.46)$$

Az utóbbiból nyilvánvaló, hogy ha \hat{A} felcserélhető \hat{H} -val, akkor az \mathcal{A} fizikai (mérhető) mennyiség mozgásállandó.

Heisenberg-kép

Az $\hat{U}(t_0, t)$ unitér transzformációval áttérhetünk egy olyan leírásra, melyben a fizikai állapotok időben állnak és az operátorok változnak (függenek az időtől). Ezt nevezzük Heisenberg-képnek:

$$|\Psi^H\rangle = \hat{U}(t_0, t)^\dagger |\Psi(t)\rangle = |\Psi(t_0)\rangle \quad (3.47)$$

és

$$\hat{A}^H(t) = \hat{U}(t_0, t)^\dagger \hat{A} \hat{U}(t_0, t) = e^{i\hat{H}(t_0-t)/\hbar} \hat{A} e^{i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}. \quad (3.48)$$

Nyilvánvaló, hogy a \hat{H} Hamilton operátor Schrödinger- és Heisenberg-képben megegyezik:

$$\hat{H}^H(t) = e^{i\hat{H}(t_0-t)/\hbar} \hat{H} e^{i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} = \hat{H}. \quad (3.49)$$

Az operátorok mozgásegyenletét megkapjuk a (3.48) egyenlet deriválásával,

$$\frac{d\hat{A}^H(t)}{dt} = \frac{d\hat{U}(t_0, t)^\dagger}{dt} \hat{A} \hat{U}(t_0, t) + \hat{U}(t_0, t)^\dagger \hat{A} \frac{d\hat{U}(t_0, t)}{dt} \quad (3.50)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \hat{U}(t_0, t)^\dagger \hat{A} \hat{H} \hat{U}(t_0, t) - \hat{U}(t_0, t)^\dagger \hat{H} \hat{A} \hat{U}(t_0, t) \quad (3.51)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{A}^H(t), \hat{H} \right]. \quad (3.52)$$

Az \mathcal{A} dinamikai mennyiség időbeli változását a Heisenberg-képben a

$$\frac{d\mathcal{A}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \Psi_1^H \left| \left[\hat{A}^H(t), \hat{H} \right] \right| \Psi_2^H \right\rangle \quad (3.53)$$

egyenlet írja le, mely nyilvánvalóan ekvivalens a (3.46) összefüggéssel.

Kölcsönhatási (Dirac-) kép

Ezt a képet abban az esetben célszerű használni, ha a \hat{H} Hamilton operátor előáll egy időfüggetlen \hat{H}_0 és egy \hat{K} "kölcsönhatási" operátor összegeként, mely explicit időfüggést is tartalmazhat,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{K}(t) . \quad (3.54)$$

A Schrödinger- és a Dirac-kép közötti transzformációt az

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar} \quad (3.55)$$

unitér transzformáció definiálja, azaz mind az állapotok,

$$|\Psi^D(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle = e^{i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar}|\Psi(t_0)\rangle , \quad (3.56)$$

és az operátorok,

$$\hat{A}^D(t) = \hat{U}(t_0, t)\hat{A}\hat{U}(t_0, t)^\dagger = e^{i\hat{H}_0(t_0-t)/\hbar}\hat{A}e^{-i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar} , \quad (3.57)$$

függenek az időtől („mozognak”).

Mozgásegyenletek:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi^D(t)\rangle = \frac{d\hat{U}(t, t_0)}{dt} |\Psi(t)\rangle + \hat{U}(t, t_0) \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} \quad (3.58)$$

$$= -\frac{1}{i\hbar} \hat{H}_0 \hat{U}(t, t_0) |\Psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \hat{U}(t, t_0) \left(\hat{H}_0 + \hat{K}(t) \right) |\Psi(t)\rangle \quad (3.59)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \hat{U}(t, t_0) \hat{K}(t) |\Psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} \hat{K}^D(t) |\Psi^D(t)\rangle \quad (3.60)$$

↓

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi^D(t)\rangle = \hat{K}^D(t) |\Psi^D(t)\rangle , \quad (3.61)$$

illetve

$$\frac{d\hat{A}^D(t)}{dt} = \frac{d\hat{U}(t, t_0)}{dt} \hat{A} \hat{U}(t_0, t)^\dagger + \hat{U}(t_0, t) \hat{A} \frac{d\hat{U}(t_0, t)^\dagger}{dt} = \quad (3.62)$$

$$= -\frac{1}{i\hbar} \hat{H}_0 \hat{U}(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t_0, t)^\dagger + \frac{1}{i\hbar} \hat{U}(t, t_0) \hat{A} \hat{H}_0 \hat{U}(t_0, t)^\dagger \quad (3.63)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{A}^D(t), \hat{H}_0^D(t) \right] . \quad (3.64)$$

Az A dinamikai mennyiség időbeli változása a Dirac-képben:

$$\frac{d\mathcal{A}(t)}{dt} = \frac{d}{dt} \langle \Psi_1^D(t) | \hat{A}^D(t) | \Psi_2^D(t) \rangle \quad (3.65)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi_1^D(t) | \hat{A}^D(t) \hat{K}^D(t) - \hat{K}^D(t) \hat{A}^D(t) + [\hat{A}^D(t), \hat{H}_0^D(t)] | \Psi_2^H(t) \rangle \quad (3.66)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi_1^D(t) | [\hat{A}^D(t), \hat{H}^D(t)] | \Psi_2^H(t) \rangle, \quad (3.67)$$

ami ismételtén ekvivalens az (3.53) és (3.46) egyenletekkel.

Az állapot időfüggése expliciten meghatározható a (3.61) egyenlet kiintegrálásával,

$$|\Psi^D(t)\rangle = \hat{S}(t, t_0) |\Psi^D(t_0)\rangle, \quad (3.68)$$

ahol az állapotok időfejlésztő operátora a Dirac-képben:

$$\hat{S}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{K}^D(t_1) \hat{K}^D(t_2) \dots \hat{K}^D(t_n) \quad (3.69)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 \dots \int_{t_0}^t dt_n \mathcal{T} \hat{K}^D(t_1) \hat{K}^D(t_2) \dots \hat{K}^D(t_n), \quad (3.70)$$

ahol \mathcal{T} az időrendezést jelöli:

$$\mathcal{T} \hat{K}^D(t_1) \hat{K}^D(t_2) \dots \hat{K}^D(t_n) = \hat{K}^D(t'_1) \hat{K}^D(t'_2) \dots \hat{K}^D(t'_n)$$

$$(t'_1, t'_2, \dots, t'_n) \in \underbrace{P(t_1, t_2, \dots, t_n)}_{t_1, t_2, \dots, t_n \text{ permutációi}} : t'_1 > t'_2 > \dots > t'_n.$$

Szokás az $\hat{S}(t, t_0)$ operátort a kompakt,

$$\hat{S}(t, t_0) = \mathcal{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{K}^D(t') dt' \right). \quad (3.71)$$

alakban is írni, amely azonban csak egy jelölés. Egyrészt a különböző időponthoz tartozó \hat{K}^D operátorok nem feltétlenül kommutálnak, nem mindegy ezek sorrendje, másrészt az exponenciálisban szereplő időintegrál elvégzése után már nem lenne mit időrendezni. A (3.71) egyenlet tehát csak egy jelölés, ami alatt tehát mindig a (3.69) képletet kell érteni.

3.2. Feladatok

3.2.1. Példák

3.1. Feladat Adja meg a lineáris harmonikus oszcillátor Schrödinger-egyenletét impulzus térben! Határozza meg a sajátértékeket és a sajátfüggvényeket!

3.2. Feladat Tekintsük a következő hullámfüggvényt:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma_0^2}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma_0^2}}. \quad (3.72)$$

a) Adjuk meg a fenti hullámfüggvény $\varphi(p)$ impulzusreprezentációját!

b) Írjuk föl az időtől függő Schrödinger egyenletet impulzustérben a $\varphi(p, t)$ függvényre, feltételezve, hogy azt a következő szabad Hamilton operátor fejleszti:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} ! \quad (3.73)$$

c) Adjuk meg valós térben is a $\psi(x, t)$ hullámfüggvényt!

3.3. Feladat Az 1.7. feladatban láttuk, hogy a $\widehat{P}_{[0,L]} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ operátort a

$$D(\widehat{P}_{[0,L]}) = \{\psi \in L^2([0, L]) \mid \psi' \in L^2([0, L]) \text{ és } \psi(0) = \psi(L) = 0\} \quad (3.74)$$

értelmezési tartományon szimmetrikus de nem önadjungált. Az L széles végtelen mély potenciáldobozba zárt részecske (2.4. feladat) esetén azonban épp $D(\widehat{P}_{[0,L]})$ az értelmezési tartomány. Az axiómák között azonban azt is rögzítettük, hogy a dinamikai mennyiségeket (így az impulzust is) önadjungált operátorokkal reprezentáljuk így az impulzus reprezentálására nem használhatjuk a $\widehat{P}_{[0,L]}$ operátort. Az impulzus lehetséges értékeinek eloszlását leíró impulzus-térbeli hullámfüggvényt azonban könnyen meghatározhatjuk. Mi lesz ennek az alakja?

3.4. Feladat Oldjuk meg impulzus reprezentációban a Schrödinger-egyenletet $V(x) = q\mathcal{E}x$ ($\mathcal{E} > 0$) lineáris potenciálra! Mutassuk meg, hogy koordináta reprezentációban az E sajátenergiához tartozó sajátfüggvény

$$\Psi(x) = \frac{\sqrt{2}\alpha}{\hbar} \text{Ai} \left(\frac{\alpha}{\hbar} \left(x - \frac{E}{q\mathcal{E}} \right) \right) \quad (3.75)$$

Segítség:

$$\text{Ai}(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \cos \left(\frac{t^3}{3} + ty \right) dt$$

az Airy-függvény. Említsük meg, hogy az Airy-függvény aszimptotikus alakja

$$\text{Ai}(y) \simeq \begin{cases} \frac{1}{2y^{1/4}} \exp \left(-\frac{2}{3}y^{3/2} \right) & y \rightarrow \infty \\ \frac{1}{|y|^{1/4}} \sin \left(\frac{2}{3}|y|^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right) & y \rightarrow -\infty \end{cases}.$$

3.5. Feladat Adjuk meg az \hat{x} koordináta és a \hat{p} impulzus operátor mátrixát a harmonikus oszcillátor betöltési szám reprezentációjában, vagyis az $|n\rangle$ vektorok bázisán! Teljesül-e a mátrixokra a Heisenberg-féle felcserélési reláció?

3.6. Feladat Az m tömegű részecske háromdimenziós harmonikus rezgéseit leíró Hamilton operátor

$$H = \frac{1}{2m} \sum_{n=1}^3 p_n^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \sum_{n=1}^3 x_n^2 \quad ,$$

ahol ω az oszcillátor sajátfrekvenciája. Vezessük be az

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x_n}{x_0} + i \frac{p_n}{p_0} \right) \quad \text{és} \quad a_n^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x_n}{x_0} - i \frac{p_n}{p_0} \right) \quad , \quad n = 1, 2, 3$$

léptető operátorokat, ahol

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad , \quad p_0 = \sqrt{\hbar m \omega} \quad .$$

Mutassuk meg, hogy az impulzusmomentum operátor előáll az

$$\mathbf{L} = \frac{\hbar}{i} \mathbf{a}^\dagger \times \mathbf{a}$$

alakban! Felhasználva a Hamilton operátor léptető operátoros kifejezését bizonyítsuk be, hogy $[H, \mathbf{L}] = 0$! Milyen más megfontolás alapján juthatunk ugyanerre az eredményre?

3.7. Feladat A $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ határozatlansági összefüggés alapján mutassuk meg, hogy az egydimenziós oszcillátor energiája nem lehet kisebb mint $\hbar\omega/2$!

3.8. Feladat Határozza meg ΔL_x és ΔL_y értékét az L^2 és L_z operátorok tetszőleges közös sajátállapotában!

3.9. Feladat Az \hat{L}^2 és \hat{L}_z operátorok közös $|\ell, \ell\rangle$ sajátállapotában \hat{L}^2 sajátértéke $\hbar^2 \ell(\ell+1)$, míg \hat{L}_z^2 sajátértéke $\hbar^2 \ell^2$. Mutassuk meg, hogy a két sajátérték közti eltérés \hat{L}_x és \hat{L}_y elmosódottságából adódik!

Segítség: Vizsgáljuk az $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$ kommutátor várható értékét egy $|\ell, m\rangle$ állapotban!

3.10. Feladat Egy egydimenziós harmonikus oszcillátor esetén az a, a^\dagger lefelé és felfelé léptető operátorokat transzformáljuk Heisenberg képbe!

3.11. Feladat Egy rendszer Hamilton operátorát a következő képpen írhatjuk fel:

$$H = H_0 + V(t)$$

Írjuk fel az időfüggő Schrödinger egyenletet kölcsönhatási képben!

3.2.2. Megoldások

3.1 Megoldás A harmonikus oszcillátor Hamilton operátora a következő:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2\hat{x}^2$$

Impulzus reprezentációban az impulzus operátora az impulzussal való szorzás, a hely operátora pedig az impulzus szerinti deriválás:

$$\hat{x} = -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp},$$

ennek megfelelően az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet a következőképpen írhatjuk fel:

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p) - \frac{m}{2}\hbar^2\omega^2\frac{d^2\varphi}{dp^2} = E\varphi(p).$$

A Schrödinger-egyenlet megoldásához előbb tekintsük a harmonikus oszcillátor sajátérték egyenletét koordináta reprezentációban:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{m}{2}\omega^2x^2\varphi(x) = E\varphi(x),$$

amelynek a megoldásai a (2.50) egyenlet alapján

$$\varphi_n(x) = N_n H_n \left(\frac{x}{x_0} \right) e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} \quad (3.76)$$

alakúak lesznek, ahol $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. Rendezzük át a két reprezentációban felírt Schrödinger egyenletet, és használjuk a $p_0 = \sqrt{\hbar m\omega}$ jelölést:

$$\begin{aligned} -\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{1}{x_0^4}x^2\varphi(x) &= \frac{2m}{\hbar^2}E\varphi(x) \\ \frac{1}{p_0^4}p^2\varphi(p) - \frac{d^2\varphi}{dp^2} &= \frac{2}{m\omega^2\hbar^2}E\varphi(p) \end{aligned}$$

A két egyenletet összevetve felírhatjuk az impulzus reprezentációból sajátfüggvényeket:

$$\varphi_n(p) = N_n H_n \left(\frac{p}{p_0} \right) e^{-\frac{p^2}{2p_0^2}}.$$

A sajátenergiák nyilvánvalóan megegyeznek a két reprezentációban.

3.2 Megoldás a) A hullámfüggvény impulzus reprezentációbeli alakja $\varphi(p)$ Fourier transzformáltja lesz:

$$\begin{aligned} \varphi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}px} \psi(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma_0^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{4\sigma_0^2} + \frac{i}{\hbar}px} dx = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma_0^2}} e^{-\frac{\sigma_0^2}{\hbar^2}p^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4\sigma_0^2} \left(x - 2i \frac{\sigma_0^2}{\hbar} p \right)^2} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma_0^2}} e^{-\frac{\sigma_0^2}{\hbar^2}p^2} \sqrt{2\pi 2\sigma_0^2} = \\ &= \sqrt[4]{\frac{2\sigma_0^2}{\hbar^2\pi}} e^{-\frac{\sigma_0^2}{\hbar^2}p^2} \end{aligned}$$

b) Az időfüggő Schrödinger egyenlet:

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(p, t),$$

melynek megoldása

$$\varphi(p, t) = \sqrt[4]{\frac{2\sigma_0^2}{\hbar^2\pi}} e^{-\frac{\sigma_0^2}{\hbar^2}p^2} e^{-i\omega t}.$$

Behelyettesítve az időfüggő Schrödinger egyenletbe $\hbar\omega = \frac{p^2}{2m}$ adódik. Tehát az időfüggő hullámfüggvényt a következő alakba írhatjuk fel:

$$\varphi(p, t) = \sqrt[4]{\frac{2\sigma_0^2}{\hbar^2\pi}} e^{-\frac{1}{\hbar^2}(\sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m})p^2}$$

c) A koordináta reprezentációbeli hullámfüggvényt az impulzus térbeli hullámfüggvény inverz Fourier transzformációjával kaphatjuk meg:

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}px} \sqrt[4]{\frac{2\sigma_0^2}{\hbar^2\pi}} e^{-\frac{1}{\hbar^2}(\sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m})p^2} dp = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt[4]{\frac{2\sigma_0^2}{\hbar^2\pi}} e^{-\frac{x^2}{4(\sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m})}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{\hbar^2}(\sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m})\left(p + \frac{i\hbar}{2} \frac{x}{\sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m}}\right)^2} dp = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt[4]{\frac{2\sigma_0^2}{\hbar^2\pi}} e^{-\frac{x^2}{4(\sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m})}} \sqrt{2\pi \frac{\hbar^2}{2(\sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m})}} = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi(\sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m})^2}} e^{-\frac{x^2}{4(\sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m})}}\end{aligned}$$

3.3 Megoldás A valós térbeli hullámfüggvény alakja:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{e^{i\frac{n\pi}{L}x} - e^{-i\frac{n\pi}{L}x}}{2i} \quad (3.77)$$

A Fourier-komponensek itt ránézésre látszanak, így az impulzustérbeli hullámfüggvényre a naiv várakozás egy $\frac{n\pi}{L}$ -re és egy $-\frac{n\pi}{L}$ -re egyenlő súllyal centrált hullámfüggvény lenne, amelyből

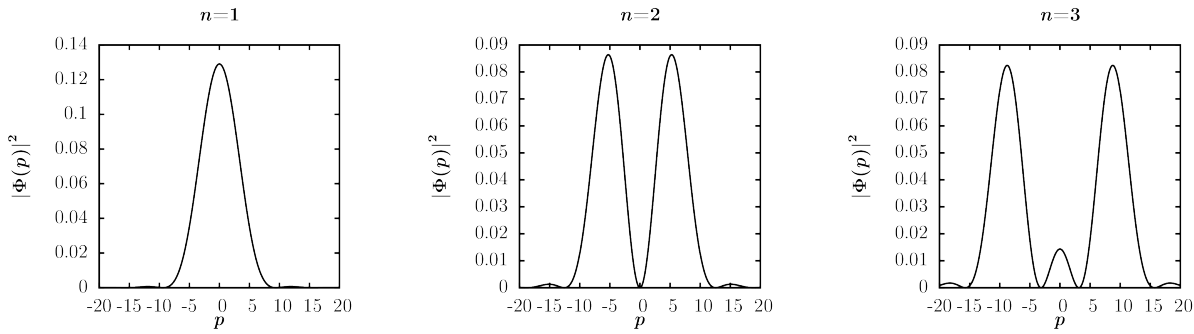
$$\mathbb{P}\left(p = \frac{\hbar n\pi}{L}\right) = \frac{1}{2} \quad \mathbb{P}\left(p = -\frac{\hbar n\pi}{L}\right) = \frac{1}{2} \quad (3.78)$$

valószínűségi eloszlást kapnánk a mérési eredményekre, amit két Dirac-deltával írhatunk le:

$$|\Phi(p)|^2 = \frac{1}{2}\delta\left(p - \frac{\hbar n\pi}{L}\right) + \frac{1}{2}\delta\left(p + \frac{\hbar n\pi}{L}\right) \quad (3.79)$$

Fourier-transzformálnunk azonban teljes \mathbb{R} -en kell, a 2.11 megoldáshoz hasonlóan akkor jutunk helyes eredményre, ha a teljes \mathbb{R} -en dolgozunk. Az előző eredmény akkor lenne helyes, ha a hullámfüggvény periodikusan folytatódna! Valójában a hullámfüggvény alakja

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \text{Rect}\left(\frac{x}{L} - \frac{1}{2}\right) = \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{e^{i\frac{n\pi}{L}x} - e^{-i\frac{n\pi}{L}x}}{2i} \text{Rect}\left(\frac{x}{L} - \frac{1}{2}\right), \quad (3.80)$$



3.1. ábra. $|\Phi(p)|^2$ alakja különböző n -hez tartozó gerjesztett állapotok esetén.

ahol $Rect(x)$ az ablak-függvény:

$$Rect(x) = \begin{cases} 1, & \text{ha } |x| < \frac{1}{2} \\ 0, & \text{ha } |x| > \frac{1}{2} \end{cases} \quad (3.81)$$

Tudjuk, hogy függvények szorzata Fourier-térben konvolúcióvá válik. Mivel az exponenciális függvények Fourier-transzformáltjai a $\pm \frac{n\pi}{L}$ helyre centrált Dirac-delták, és a $Rect$ függvény Fourier transzformáltja egy $\mathcal{F}Rect(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{sinc}\left(\frac{p}{2}\right)$, ahol $\text{sinc}(x) = \frac{\sin x}{x}$, a hullámfüggvény Fourier-transzformáltja:

$$\Phi(p) = \mathcal{F}\Psi(x) = \frac{i}{2} \sqrt{\frac{L}{\pi\hbar}} e^{i\frac{pL}{\hbar} - n\pi} \left[\text{sinc}\left(\frac{1}{2}\left(\frac{pL}{\hbar} - n\pi\right)\right) - e^{in\pi} \text{sinc}\left(\frac{1}{2}(p + n\pi)\right) \right] \quad (3.82)$$

$|\Phi(p)|^2$ különböző n értékekre a 3.1 ábrán látható $L = 1$ és $\hbar = 1$ egységeket használva.

3.4 Megoldás A rendszer időfüggetlen Schrödinger egyenletét a következőképpen adhatjuk meg impulzus reprezentációban:

$$\frac{p^2}{2m} \varphi(p) - q\mathcal{E} \frac{\hbar}{i} \frac{d\varphi}{dp} = E\varphi(p).$$

Rendezzük át a differenciál egyenletet:

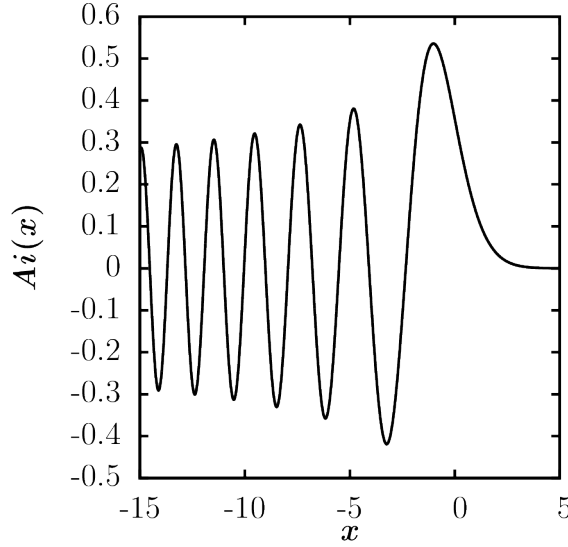
$$\frac{d\varphi}{dp} = i \left(\frac{p^2}{2m} - E \right) \frac{1}{q\mathcal{E}\hbar} \varphi(p) \quad (3.83)$$

$$\ln \varphi = i \left(\frac{p^3}{6m} - Ep \right) \frac{1}{q\mathcal{E}\hbar} + \ln C \quad (3.84)$$

$$\varphi(p) = C e^{i \left(\frac{p^3}{6m} - Ep \right) \frac{1}{q\mathcal{E}\hbar}} \quad (3.85)$$

Világos, hogy $\varphi(p)$ normája divergál, tehát szórási állapottal van dolgunk. Így a C konstans akár el is hagyható. Hátra van még az eredmény valós térbe való áttranszformálása, amely egy inverz Fourier-transzformációt jelent:

$$\psi(E, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i \left(\frac{px}{\hbar} + \left(\frac{p^3}{6m} - Ep \right) \frac{1}{q\mathcal{E}\hbar} \right)} \frac{dp}{\hbar} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi\hbar}} \int_0^{\infty} \cos \left(\frac{p^3}{6mq\mathcal{E}\hbar} + \left(\frac{x}{\hbar} - \frac{E}{q\mathcal{E}\hbar} \right) p \right) dp \quad (3.86)$$



3.2. ábra.

Bevezetve $\alpha = \sqrt[3]{2mq\mathcal{E}\hbar}$ -t, illetve $t = \frac{p}{\alpha}$ változót, illetve felhasználva a (3.75) egyenletet a következőt kapjuk:

$$\psi(E, x) = \frac{\sqrt{2}\alpha}{\sqrt{\pi\hbar}} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{t^3}{3} + \frac{\alpha}{\hbar}\left(x - \frac{E}{q\mathcal{E}}\right)t\right) dt = \frac{\sqrt{2}\alpha}{\hbar} \text{Ai}\left(\frac{\alpha}{\hbar}\left(x - \frac{E}{q\mathcal{E}}\right)\right) \quad (3.87)$$

A megoldás a 3.2 ábrán látható. A lecsengő rész ott van, ahol $E < q\mathcal{E}x$, az $E > q\mathcal{E}x$ esetben oszcillál a megoldás. Az Airy-függvény $-\infty$ -ben vett limeszének lecsengése csak $|y|^{-\frac{1}{4}}$ -nel arányos, innen is látható, hogy a hullámfüggvény nem normálható (lásd: 7.1.2 fejezet elején lévő gondolatmenet).

3.5 Megoldás A (3.15)-beli definíciójából világos, hogy

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \quad (3.88)$$

Innen \hat{x} és \hat{p} mátrixa:

$$\underline{\underline{X}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad \underline{\underline{P}} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ i\sqrt{1} & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.89)$$

Ennek mátrixelemei:

$$X_{nm} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{cases} \sqrt{n} \cdot \delta_{n+1,m} + \sqrt{n-1} \cdot \delta_{n-1,m}, & \text{ha } n > 1 \\ \sqrt{n} \cdot \delta_{n+1,m}, & \text{ha } n = 1 \end{cases} \quad (3.90)$$

$$P_{nm} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \begin{cases} -i\sqrt{n} \cdot \delta_{n+1,m} + i\sqrt{n-1} \cdot \delta_{n-1,m}, & \text{ha } n > 1 \\ -i\sqrt{n} \cdot \delta_{n+1,m}, & \text{ha } n = 1 \end{cases} \quad (3.91)$$

$$(\underline{XP})_{n,k} = \sum_m X_{n,m} P_{m,k} = i \frac{\hbar}{2} \left(-\sqrt{n(n+1)}\delta_{n+2,k} + \underbrace{n\delta_{n,k} - (n-1)\delta_{n,k}}_{\delta_{n,k}} + \sqrt{(n-1)(n-2)}\delta_{n-2,k} \right) \quad (3.92)$$

$$(\underline{PX})_{n,k} = \sum_m P_{n,m} X_{m,k} = i \frac{\hbar}{2} \left(-\sqrt{n(n+1)}\delta_{n+2,k} - \underbrace{n\delta_{n,k} + (n-1)\delta_{n,k}}_{-\delta_{n,k}} + \sqrt{(n-1)(n-2)}\delta_{n-2,k} \right) \quad (3.93)$$

Innen tehát a 2.1.2 egyenletben szereplő Heisenberg-féle felcserélési reláció helyesen adódik:

$$(\underline{PX} - \underline{XP})_{n,k} = \frac{\hbar}{i} \delta_{n,k} \quad (3.94)$$

Vagy mátrix alakban:

$$\underline{PX} - \underline{XP} = \frac{\hbar}{i} I \quad (3.95)$$

3.6 Megoldás A léptető operátorok segítségével kifejezhetjük a hely és impulzus operátorokat vektoriális alakban:

$$\mathbf{r} = \frac{x_0}{\sqrt{2}} (\mathbf{a} + \mathbf{a}^\dagger) \quad , \quad \mathbf{p} = \frac{p_0}{i\sqrt{2}} (\mathbf{a} - \mathbf{a}^\dagger) \quad .$$

Az impulzuszómomentum definíciója szerint:

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

Betöltésszám reprezentációban az izotróp 3D Hamilton operátor a következő lesz:

$$H = \hbar\omega \left(\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \frac{3}{2} \right) \quad .$$

Az \mathbf{L} operátor komponenseivel vett kommutátorai a következő alakot öltik, ahol az Einstein-konvenciót alkalmazzuk:

$$\begin{aligned} [H, L_i] &= \hbar\omega \left[a_j^\dagger a_j, \epsilon_{ikl} a_k^\dagger a_l \right] = \hbar\omega \epsilon_{ikl} \left[a_j^\dagger a_j, a_k^\dagger a_l \right] \\ &= \hbar\omega \epsilon_{ikl} \left(a_j^\dagger [a_j, a_k^\dagger a_l] + [a_j^\dagger, a_k^\dagger a_l] a_j \right) = \hbar\omega \epsilon_{ikl} \left(a_j^\dagger [a_j, a_k^\dagger] a_l + a_k^\dagger [a_j^\dagger, a_l] a_j \right) \\ &= \hbar\omega \epsilon_{ikl} \left(a_j^\dagger a_l \delta_{jk} - a_k^\dagger a_j \delta_{jl} \right) = 0 \end{aligned}$$

Tehát a Hamilton-operátor felcserélhető az \mathbf{L} operátorral. Természetesen a 3D izotróp harmonikus potenciál gömbszimmetrikus, ezért az impulzuszómomentum nyilvánvalóan megmaradó mennyiség lesz.

3.7 Megoldás

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 = (\langle x^2 \rangle_n - \langle x \rangle_n^2) \cdot (\langle p^2 \rangle_n - \langle p \rangle_n^2) \quad (3.96)$$

A fenti kifejezésben szereplő tagokat kell kiszámolnunk:

$$\langle x \rangle_n = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n | a^\dagger + a | n \rangle = 0 \quad (3.97)$$

$$\langle p \rangle_n = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \langle n | a^\dagger - a | n \rangle = 0 \quad (3.98)$$

Felhasználva, hogy $[a, a^\dagger] = I$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_n &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | a^{\dagger 2} + a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a | n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | a^{\dagger 2} + a^2 + 2a^\dagger a + 1 | n \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} (0 + 0 + 2n + 1) = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle_n &= -\frac{m\hbar\omega}{2} \langle n | a^{\dagger 2} + a^2 - aa^\dagger - a^\dagger a | n \rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2} \langle n | a^{\dagger 2} + a^2 - 2a^\dagger a - 1 | n \rangle = \\ &= -\frac{m\hbar\omega}{2} (0 + 0 - 2n - 1) = m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

Ezeket behelyettesítve:

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 = (\langle x^2 \rangle_n - \langle x \rangle_n^2) \cdot (\langle p^2 \rangle_n - \langle p \rangle_n^2) = \hbar^2 \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (3.99)$$

$$\Delta x \Delta p = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (3.100)$$

Alapállapotban ($n=0$) az egyenlőtlenség épp éles. Ekkor a hullámfüggvény egy Gauss-függvény:

$$\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \quad (3.101)$$

Erről az állapotról az elméleti részben láttuk, hogy éles rá a Heisenberg-határozatlanság, ezzel összhangban áll mostani eredményünk is. A Hamilton-operátorban épp p^2 és x^2 operátorok szerepelnek, így könnyen megadhatjuk az alapállapotban ezen két tag energiajárulékát:

$$E_0 = \frac{\langle p^2 \rangle_0}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \langle x^2 \rangle_0 = \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\hbar\omega}{2} \quad (3.102)$$

Azt mondhatjuk tehát, hogy a harmonikus oszcillátor alapállapotában a Heisenberg-határozatlanság miatt elmosódott a koordináta és az impulzus, az ebből jövő energiajárulék adja az $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ nullponti energiát.

3.8 Megoldás Vezessük be az $L_+ = L_x + iL_y$ felfelé és $L_- = L_x - iL_y$ lefelé léptető operátorokat. Ezek hatása az L^2 és L_z operátorok $|l, m\rangle$ közös sajátállapotára a következőképpen adható meg:

$$\begin{aligned} L_+ |l, m\rangle &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} |l, m+1\rangle \\ L_- |l, m\rangle &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} |l, m-1\rangle . \end{aligned}$$

A léptető operátorok segítségével egyszerűen kifejezhetjük az impulzusmomentum operátor x, y komponenseit:

$$L_x = \frac{1}{2} (L_+ + L_-) , \quad L_y = \frac{1}{2i} (L_+ - L_-)$$

A ΔL_x szórás definíciója:

$$\Delta L_x = \sqrt{\langle l, m | L_x^2 | l, m \rangle - \langle l, m | L_x | l, m \rangle^2} ,$$

hasonlóképpen definiáljuk a ΔL_y -t is. Az $\langle l, m | L_x | l, m \rangle$, $\langle l, m | L_y | l, m \rangle$ várható értékek eltűnnek, hiszen

$$\begin{aligned} \langle l, m | L_x | l, m \rangle &= \frac{1}{2} \langle l, m | L_+ + L_- | l, m \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \langle l, m | l, m+1 \rangle \\ &+ \frac{1}{2} \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} \langle l, m | l, m-1 \rangle = 0 \end{aligned}$$

az ortogonalitás miatt. Hasonlóan beláthatjuk az impulzusmomentum operátor y komponensének várható értékére is. Az $\langle l, m | L_x^2 | l, m \rangle$, $\langle l, m | L_y^2 | l, m \rangle$ mennyiségek meghatározásához fejezzük ki a komponenseket a léptető operátorok segítségével:

$$\begin{aligned} \Delta L_x^2 &= \langle l, m | \frac{1}{4} (L_+ + L_-)^2 | l, m \rangle = \langle l, m | \frac{1}{4} (L_+^2 + L_-^2 + L_+ L_- + L_- L_+) | l, m \rangle \\ &= \langle l, m | \frac{1}{4} (L_+ L_- + L_- L_+) | l, m \rangle \\ \Delta L_y^2 &= \langle l, m | \frac{1}{4} (L_+ + L_-)^2 | l, m \rangle = -\langle l, m | \frac{1}{4} (L_+^2 + L_-^2 - L_+ L_- - L_- L_+) | l, m \rangle \\ &= \langle l, m | \frac{1}{4} (L_+ L_- + L_- L_+) | l, m \rangle \end{aligned}$$

Az előző képletben csak azok a tagok maradnak meg, amelyek ugyanannyi felfelé és lefelé léptető operátort tartalmaznak a sajátállapotok ortogonalitása miatt. Azt is leszűrhetjük a fenti eredményből, hogy az impulzusmomentum x és y komponensének ugyanakkora lesz a szórása.

$$\begin{aligned} \langle l, m | L_+ L_- | l, m \rangle &= |L_- | l, m \rangle|^2 = \hbar^2 (l(l+1) - m(m-1)) \\ \langle l, m | L_- L_+ | l, m \rangle &= |L_+ | l, m \rangle|^2 = \hbar^2 (l(l+1) - m(m+1)) \end{aligned}$$

Az előzőekből következik, hogy

$$\Delta L_x = \Delta L_y = \frac{1}{2} \hbar \sqrt{l(l+1) - m^2} . \quad (3.103)$$

3.9 Megoldás Tudjuk, hogy az impulzusmomentum x, y és z komponensei között fennáll a következő összefüggés:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \quad (3.104)$$

Tekintsük az \hat{L}^2 és az \hat{L}_z operátor egy közös $|l, m\rangle$ sajátfüggvényét. Ekkor $\langle l, m | \hat{L}_x | l, m \rangle = \langle l, m | \hat{L}_y | l, m \rangle = 0$. Ebben az állapotban véve a várható értékeket a (3.32) képletben, illetve $\hat{A} = \hat{L}_x$ és $\hat{B} = \hat{L}_y$ választással élve (felhasználva a (3.103) egyenletet) azt kapjuk, hogy

$$\langle l, m | \hat{L}_x^2 | l, m \rangle \langle l, m | \hat{L}_y^2 | l, m \rangle = \langle l, m | \hat{L}_x^2 | l, m \rangle^2 \geq \left(\frac{\hbar}{2} \left| \langle l, m | \hat{L}_z | l, m \rangle \right| \right)^2 \quad (3.105)$$

Gyököt vonva

$$\langle l, m | \hat{L}_x^2 | l, m \rangle \geq \frac{\hbar}{2} \left| \langle l, m | \hat{L}_z | l, m \rangle \right| \quad (3.106)$$

Mindkét oldalhoz hozzáadva $\langle \hat{L}_y^2 \rangle$ -t és $\langle \hat{L}_z^2 \rangle$ -t a következőt kapjuk:

$$\underbrace{\langle l, m | \hat{L}_x^2 | l, m \rangle + \langle l, m | \hat{L}_y^2 | l, m \rangle + \langle l, m | \hat{L}_z^2 | l, m \rangle}_{\langle l, m | \hat{L}^2 | l, m \rangle} \geq \hbar \left| \langle l, m | \hat{L}_z | l, m \rangle \right| + \langle l, m | \hat{L}_z^2 | l, m \rangle \quad (3.107)$$

Azaz

$$\hbar^2 \ell (\ell + 1) \geq \hbar^2 |m| + \hbar^2 m^2 = \hbar^2 |m| (|m| + 1) \quad (3.108)$$

Vagyis innen is megkapjuk a 4.32 egyenlet $|m| \leq \ell$ összefüggését. Azt is tudjuk, hogy ha $|m| = \ell$, akkor az \hat{L}_z^2 sajátértéke $\hbar^2 \ell^2$, ami kisebb, mint az \hat{L}^2 sajátértéke: $\hbar^2 \ell (\ell + 1)$. Ez klasszikus szemmel furcsa, hiszen azt várnánk, hogy ekkor az impulzusmomentum vektor teljesen befordul a z tengely irányába. A kvantummechanikában azonban az impulzusmomentum nem egy egyszerű vektor, hanem egy vektor operátor! Egy \hat{L}^2 és \hat{L}_z közös sajátállapotban bár $\langle \hat{L}_x \rangle = \langle \hat{L}_y \rangle = 0$, a (3.104) egyenlet miatt szórásuk mégsem 0, azaz elmosódtak. Ha egy szemléletes képet szeretnénk kicsikarni akkor azt is mondhatjuk, hogy ekkor bár az L_z komponenes maximális, az L_x és L_y Heisenberg határozatlanságból származó elmosódottsága miatt az impulzusmomentum vektor kicsit hosszabb, az x és y komponens járuléka épp a (3.107)-ben szereplő $\hbar^2 |m|$ tag, ami a $|m| = \ell$ megegyezik az \hat{L}^2 és \hat{L}_z^2 sajátértékeinek különbségével.

3.10 Megoldás Az egydimenziós harmonikus oszcillátor Hamilton operátora a léptető operátorok segítségével a következőképpen írható fel:

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$$

A léptető operátorokra a következő felcserélési relációk érvényesek:

$$[H, a] = -\hbar\omega a, \quad [H, a^\dagger] = \hbar\omega a^\dagger. \quad (3.109)$$

A Heisenberg-képre a következő transzformációval térhetünk át:

$$A_H = e^{\frac{i}{\hbar} H t} A_S e^{-\frac{i}{\hbar} H t},$$

ahol A_H és A_S egy operátor Heisenberg- és Schrödinger-képből. Alkalmazzuk a transzformációt az a lefelé léptető operátorra, és használjuk a 1.2. fejeletben szereplő Hausdorff kifejtést:

$$a_H = e^{\frac{i}{\hbar} H t} a e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = a + \frac{i}{\hbar} t [H, a] + \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\hbar} t \right)^2 [H, [H, a]] + \dots$$

Használjuk ki a (3.109) felcserélési relációkat az előző Hausdorff kifejtésben:

$$a_H = a - i\omega t a + \frac{1}{2!} (-i\omega t)^2 a + \dots = a \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-i\omega t)^n = e^{-i\omega t} a.$$

Hasonlóan határozhatjuk meg az a^\dagger felfelé léptető operátor alakját Heisenberg reprezentációban:

$$a_H^\dagger = e^{\frac{i}{\hbar} H t} a^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = e^{i\omega t} a^\dagger.$$

3.11 Megoldás Az időfüggő Schrödinger-egyenletet a következő alakban adhatjuk meg Schrödinger képen:

$$(H_0 + V(t)) |\varphi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi\rangle$$

Bővítsük a hullámfüggvényt az $I = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}$ egységoperátorral:

$$\begin{aligned} (H_0 + V(t)) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} |\varphi\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} |\varphi\rangle \\ \left(e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} H_0 + V(t) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} \right) e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} |\varphi\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} H_0 e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} |\varphi\rangle + i\hbar e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} \frac{\partial}{\partial t} e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} |\varphi\rangle \end{aligned}$$

Balról beszorozva az egyenletet az $e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}$ operátorral a következő egyenletet nyerjük:

$$e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} V(t) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} |\varphi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} |\varphi\rangle .$$

Ha bevezetjük az időfüggő potenciál és a hullámfüggvény kölcsönhatási képét,

$$V_k(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} V(t) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} , \quad |\varphi_k\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} |\varphi\rangle ,$$

akkor a következő időfüggő Schrödinger egyenletet kapjuk:

$$V_k(t) |\varphi_k(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_k(t)\rangle .$$

4. fejezet

A perdület és spin

4.1. Elmélet

4.1.1. Definíciók és felcserélési relációk

A háromdimenziós euklidészi térben az \mathbf{n} tengely körüli $d\varphi$ szögű, óramutató járásával ellentétes irányú, infinitezimális forgatást az

$$\mathbf{r}' = R(\mathbf{n}, d\varphi) \mathbf{r} = \mathbf{r} + d\varphi \mathbf{n} \times \mathbf{r} \quad (4.1)$$

transzformáció írja le. Ennek hatását egy f skalárfüggvényre az

$$f'(\mathbf{r}') = f(\mathbf{r}) \implies f'(\mathbf{r}) = f(R^{-1}(\mathbf{n}, d\varphi) \mathbf{r}) \quad (4.2)$$

összefüggés definiálja, amit a következőképpen írhatunk át:

$$\begin{aligned} f'(\mathbf{r}) &= f(\mathbf{r} - d\varphi \mathbf{n} \times \mathbf{r}) \simeq f(\mathbf{r}) - (\mathbf{n} \times \mathbf{r}) \cdot \nabla f(\mathbf{r}) d\varphi = f(\mathbf{r}) - (\mathbf{r} \times \nabla f(\mathbf{r})) \cdot \mathbf{n} d\varphi \\ &= \left(\mathbf{I} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{L} \mathbf{n} d\varphi \right) f(\mathbf{r}) , \end{aligned} \quad (4.3)$$

ahol bevezettük az

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla = \mathbf{r} \times \mathbf{p} , \quad (4.4)$$

perdületoperátort. Könnyen belátható, hogy teszőleges $R(\mathbf{n}, \varphi) \in \text{SO}(3)$ forgatásra,

$$f'(\mathbf{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{L} \mathbf{n} \varphi} f(\mathbf{r}) . \quad (4.5)$$

A perdület (impulzusmomentum) definíciója a kvantummechanikában tehát formálisan megegyezik a klasszikus mechanikai tömegpont perdületével, azonban, a hely- és impulzusoperátorok közötti csererelációk következtében, komponensei nem felcserélhetőek:

$$[L_\alpha, L_\beta] = i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} L_\gamma , \quad (4.6)$$

vagy komponensenként felírva,

$$[L_x, L_y] = i\hbar (x p_y - y p_x) = i\hbar L_z , \quad (4.7)$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar (z p_y - y p_z) = i\hbar L_x, \quad (4.8)$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar (z p_x - x p_z) = i\hbar L_y, \quad (4.9)$$

illetve összesítve

$$\mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\hbar \mathbf{L}. \quad (4.10)$$

A (4.6) vagy (4.10) relációkat kielégítő vektoroperátorok ún. *Lie-algebrát* alkotnak.

4.1. Tétel *Az L_i operátorok közös $|\psi\rangle$ sajátfüggvényei csak a zérus sajátértékhez tartozhatnak.*

Bizonyítás. Tételezzük fel pl., hogy $|\psi\rangle$ az L_x és L_y közös sajátfüggvénye valamely a illetve b sajátértékkel:

$$L_x |\psi\rangle = a |\psi\rangle, \quad L_y |\psi\rangle = b |\psi\rangle.$$

Ekkor a (4.7) egyenletből következik,

$$L_z |\psi\rangle = \frac{1}{i\hbar} (L_x L_y |\psi\rangle - L_y L_x |\psi\rangle) = |0\rangle.$$

Viszont akkor (4.8) alapján

$$L_x |\psi\rangle = \frac{1}{i\hbar} (L_y L_z |\psi\rangle - L_z L_y |\psi\rangle) = |0\rangle,$$

és ugyanígy, (4.9) alapján $L_y |\psi\rangle = 0$, tehát $a = b = 0$. \square

4.2. Tétel *A csererelációkból következik, hogy az $\mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ operátor a perdületoperátor bármely komponensével kommutál.*

Bizonyítás.

$$\begin{aligned} [L^2, L_\alpha] &= [L_\beta L_\beta, L_\alpha] = L_\beta [L_\beta, L_\alpha] + [L_\beta, L_\alpha] L_\beta \\ &= i\hbar \epsilon_{\beta\alpha\gamma} (L_\beta L_\gamma + L_\gamma L_\beta) = i\hbar (\epsilon_{\beta\alpha\gamma} + \epsilon_{\beta\gamma\alpha}) L_\beta L_\gamma = 0. \end{aligned} \quad (4.11)$$

\square

4.1.2. Az impulzusmomentum operátorok sajátértékei

Az általánosság kedvéért jelöljük a Lie-algebrát alkotó vektoroperátorokat J_α -val. Az \mathbf{J}^2 és bármely J_i operátoroknak létezik közös sajátfüggvény rendszere. Tradicionális okokból válasszuk ki a J_z operátort és vezessük be a

$$J_\pm \equiv J_x \pm iJ_y \Rightarrow (J_\pm)^\dagger = J_\mp \quad (4.12)$$

operátorokat, melyekre teljesülnek az alábbi csererelációk,

$$[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm, \quad [J_+, J_-] = 2\hbar J_z, \quad [\mathbf{J}^2, J_\pm] = 0. \quad (4.13)$$

Fejezzük ki az \mathbf{J}^2 operátort az J_{\pm} és J_z operátorokkal:

$$J_+ J_- = (J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 + \underbrace{i(J_y J_x - J_x J_y)}_{-i\hbar J_z} = J_x^2 + J_y^2 + \hbar J_z = \mathbf{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z \quad (4.14)$$

$$J_- J_+ = (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 - \underbrace{i(J_y J_x - J_x J_y)}_{-i\hbar J_z} = J_x^2 + J_y^2 - \hbar J_z = \mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z \quad (4.15)$$

⇓

$$\mathbf{J}^2 = \frac{1}{2} (J_+ J_- + J_- J_+) + J_z^2 . \quad (4.16)$$

Vezessük be \mathbf{J}^2 és J_z közös sajátfüggvényeit,

$$\mathbf{J}^2 |\Lambda, \mu\rangle = \hbar^2 \Lambda |\Lambda, \mu\rangle , \quad (4.17)$$

$$J_z |\Lambda, \mu\rangle = \hbar \mu |\Lambda, \mu\rangle , \quad (4.18)$$

valamint

$$\langle \Lambda, \mu | \Lambda', \mu' \rangle = \delta_{\Lambda\Lambda'} \delta_{\mu\mu'} . \quad (4.19)$$

Mivel \mathbf{J}^2 pozitív szemidefinit, $\Lambda \geq 0$. Továbbá,

$$\langle \Lambda, \mu | J_x^2 + J_y^2 | \Lambda, \mu \rangle = \langle \Lambda, \mu | \mathbf{J}^2 - J_z^2 | \Lambda, \mu \rangle = \hbar^2 (\Lambda - \mu^2) \geq 0 \quad \longrightarrow \quad \mu^2 \leq \Lambda . \quad (4.20)$$

Vizsgáljuk meg az J_{\pm} operátorok hatását a $|\Lambda, \mu\rangle$ sajátfüggvényekre:

$$J_z J_{\pm} |\Lambda, \mu\rangle = [J_z, J_{\pm}] |\Lambda, \mu\rangle + J_{\pm} J_z |\Lambda, \mu\rangle = \pm \hbar J_{\pm} |\Lambda, \mu\rangle + \hbar \mu J_{\pm} |\Lambda, \mu\rangle = \hbar (\mu \pm 1) J_{\pm} |\Lambda, \mu\rangle , \quad (4.21)$$

azaz $J_{\pm} |\Lambda, \mu\rangle$ J_z -nek sajátfüggvénye $\hbar (\mu \pm 1)$ sajátértékkal. Ezért J_+ -t *felfelé*, J_- -t pedig *lefelé léptető* operátornak nevezzük. Mivel azonban J_{\pm} kommutál \mathbf{J}^2 -tel, $J_{\pm} |\Lambda, \mu\rangle$ változatlan ($\hbar^2 \Lambda$) sajátértékkal \mathbf{J}^2 operátor sajátfüggvénye:

$$J_{\pm} |\Lambda, \mu\rangle = Q_{\Lambda, \mu}^{\pm} |\Lambda, \mu \pm 1\rangle , \quad (4.22)$$

ahol a $Q_{\Lambda, \mu}^{\pm}$ normálási faktorok között fennáll a következő összefüggés:

$$Q_{\Lambda, \mu}^+ = \langle \Lambda, \mu + 1 | J_+ | \Lambda, \mu \rangle = \langle \Lambda, \mu | J_- | \Lambda, \mu + 1 \rangle^* = (Q_{\Lambda, \mu+1}^-)^* . \quad (4.23)$$

ill. $Q_{\Lambda, \mu}^{\pm}$ -kat valósnak választva,

$$Q_{\Lambda, \mu} \equiv Q_{\Lambda, \mu}^+ = Q_{\Lambda, \mu+1}^- . \quad (4.24)$$

A fentiekből következik, hogy

$$J_- J_+ |\Lambda, \mu\rangle = Q_{\Lambda, \mu}^2 |\Lambda, \mu\rangle \quad \text{és} \quad J_+ J_- |\Lambda, \mu\rangle = Q_{\Lambda, \mu-1}^2 |\Lambda, \mu\rangle . \quad (4.25)$$

Felhasználva a (4.14) és (4.15) azonosságokat könnyen belátható, hogy

$$Q_{\Lambda, \mu} = \hbar \sqrt{\Lambda - \mu(\mu + 1)} \quad \text{és} \quad Q_{\Lambda, \mu-1} = \hbar \sqrt{\Lambda - \mu(\mu - 1)}, \quad (4.26)$$

ahol teljesül a $\Lambda \geq |\mu|(|\mu| + 1) > \mu^2$ egyenlőtlenség.

Mivel az J_+ operátor egymásutáni hattatásával egyre növekvő μ sajátértékű állapotba jutunk, nyilvánvalóan létezik olyan $\mu_{\max} > 0$, hogy $\mu_{\max}^2 \leq \Lambda < (\mu_{\max} + 1)^2$. A (4.20) feltétel miatt azonban ilyen $\mu_{\max} + 1$ sajátérték nem létezhet, így szükségszerűen

$$J_+ |\Lambda, \mu_{\max}\rangle = | \rangle_0, \quad (4.27)$$

ahol $| \rangle_0$ a Hilbert tér nulleleme. Ezt felhasználva a (4.15) egyenletből rögtön következik, hogy

$$\Lambda - \mu_{\max}(\mu_{\max} + 1) = 0. \quad (4.28)$$

Hasonló megfontolással létezik olyan $\mu_{\min} < 0$, hogy $\mu_{\min}^2 \leq \Lambda < (\mu_{\min} - 1)^2$. Ekkor

$$J_- |\Lambda, \mu_{\min}\rangle = | \rangle_0, \quad (4.29)$$

és a (4.14) egyenletet alkalmazva

$$\Lambda - \mu_{\min}(\mu_{\min} - 1) = \Lambda - |\mu_{\min}|(|\mu_{\min}| + 1) = 0, \quad (4.30)$$

következik. A (4.28) és (4.30) feltételek összevetésével:

$$\mu_{\max}(\mu_{\max} + 1) - |\mu_{\min}|(|\mu_{\min}| + 1) = (\mu_{\max} - |\mu_{\min}|)(\mu_{\max} + |\mu_{\min}| + 1) = 0 \quad (4.31)$$

↓

$$\mu_{\max} = |\mu_{\min}| = j, \quad (4.32)$$

és

$$\Lambda = j(j + 1). \quad (4.33)$$

Szokás szarint a $|\Lambda, \mu\rangle$ sajátállapotokat $|j, \mu\rangle$ -vel jelöljük. Mivel a $|j, -j\rangle$ állapotból a $|j, j\rangle$ állapotba J_+ -t hattatva egész számú lépésben jutunk el, azaz

$$2j = 0, 1, 2, \dots \quad \longrightarrow \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad \text{vagy} \quad j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots, \quad (4.34)$$

Világos, hogy adott j mellett μ összesen $2j + 1$ különböző értéket vehet fel, vagyis az adott j -hez tartozó altér $2j + 1$ dimenziós. Az operátorok hatását összefoglalva:

$$\mathbf{J}^2 |j, \mu\rangle = \hbar^2 j(j + 1) |j, \mu\rangle \quad (4.35)$$

$$(4.36)$$

$$J_z |j, \mu\rangle = \hbar \mu |j, \mu\rangle \quad (4.37)$$

$$(4.38)$$

$$J_{\pm} |j, \mu\rangle = \hbar \sqrt{j(j + 1) - \mu(\mu \pm 1)} |j, \mu \pm 1\rangle. \quad (4.39)$$

4.1.3. Az elektron spinje

Az $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ pályaperdület operátorok sajátértékei szigorúan az $\ell = 0, 1, 2, \dots$ kvantumszámokhoz tartoznak. Kísérleti tények (pl. Stern-Gerlach kísérlet) arra mutattak rá, hogy az elektron a pályaperdület mellett rendelkezik egy olyan impulzusmomentummal, melynek sajátértékei és sajátfüggvényei a $j = \frac{1}{2}$ esetnek felelnek meg. Ezt az elektron *spinjének* nevezzük és a spinoperátorokat S_α -val jelöljük. Mivel a spinoperátorok sajátaltere kétdimenziós ($s = \frac{1}{2}$, $2s + 1 = 2$), a Hilbert tér izomorf a kétkomponensű vektorok terével. Ha ennek bázisát az S_z sajátvektorainak választjuk, akkor a spinoperátorok mátrixreprezentációja,

$$S_\alpha = \frac{\hbar}{2} \sigma_\alpha, \quad (4.40)$$

ahol σ_α a Pauli-mátrixokat jelöli,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.41)$$

Direkt ellenőrzéssel belátható, hogy

$$\sigma_\alpha \sigma_\beta = \delta_{\alpha\beta} + i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_\gamma, \quad (4.42)$$

ami egyrészt összhangban van a perdületoperátorok csererelációjával,

$$[\sigma_\alpha, \sigma_\beta] = 2i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_\gamma, \quad (4.43)$$

másrészt viszont érdekes (és fontos, ld. 9.1 fejezet) antikommutátor relációhoz vezet,

$$\{\sigma_\alpha, \sigma_\beta\} = \sigma_\alpha \sigma_\beta + \sigma_\beta \sigma_\alpha = 2\delta_{\alpha\beta}. \quad (4.44)$$

A kétdimenziós tér valódi forgatásainak ábrázolásai ugyancsak felírhatók a spinoperátorok segítségével, $U(\mathbf{n}, \varphi) \in SU(2)$

$$U(\mathbf{n}, \varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{S} \mathbf{n} \varphi} = e^{-\frac{1}{2} i \sigma \mathbf{n} \varphi}. \quad (4.45)$$

Ennek egy érdekes következménye, hogy egy körbefordulás ábrázolása, $U(\mathbf{n}, 2\pi) = -I$, míg a kétszeres körbefordulás ábrázolása $U(\mathbf{n}, 4\pi) = I$ (kétértékű ábrázolás, l. Keszthelyi Tamás: Bevezetés a csoportelmélet alapjaiba fizikus hallgatóknak).

4.1.4. Impulzusmomentum összeadási szabályok

Legyen \mathbf{J}_1 és \mathbf{J}_2 két vektoroperátor, mely két különböző Hilbert-téren hat,

$$\mathbf{J}_i : \mathcal{H}_i \rightarrow \mathcal{H}_i, \quad \mathbf{J}_i \times \mathbf{J}_i = i\hbar \mathbf{J}_i, \quad (4.46)$$

$$\mathbf{J}_i^2 |j_i, \mu_i\rangle_i = \hbar^2 j_i(j_i + 1) |j_i, \mu_i\rangle_i, \quad J_{i,z} |j_i, \mu_i\rangle_i = \hbar \mu_i |j_i, \mu_i\rangle_i, \quad (4.47)$$

$$J_{i,\pm} |j_i, \mu_i\rangle = \hbar \sqrt{j_i(j_i + 1) - \mu_i(\mu_i \pm 1)} |j_i, \mu_i \pm 1\rangle, \quad (4.48)$$

$$|j_i, \mu_i\rangle_i \in \mathcal{H}_i \quad (i = 1, 2). \quad (4.49)$$

Terjesszük ki ezen vektoroperátorokat a Hilbert-terek tenzorszorzatára (jelöljük a \mathcal{H}_2 -n ható identitást I_2 -vel),

$$\mathbf{J}_i : \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 , \quad (4.50)$$

$$(\mathbf{J}_1^2 \otimes I_2) |j_1, \mu_1\rangle \otimes |j_2, \mu_2\rangle = \hbar^2 j_1(j_1 + 1) |j_1, \mu_1\rangle_1 \otimes |j_2, \mu_2\rangle_2 , \quad (4.51)$$

$$(J_{1,z} \otimes I_2) |j_1, \mu_1\rangle \otimes |j_2, \mu_2\rangle = \hbar \mu_1 |j_1, \mu_1\rangle_1 \otimes |j_2, \mu_2\rangle_2 , \quad (4.52)$$

$$(J_{1,\pm} \otimes I_2) |j_1, \mu_1\rangle \otimes |j_2, \mu_2\rangle = \hbar \sqrt{j_1(j_1 + 1) - \mu_1(\mu_1 \pm 1)} |j_1, \mu_1 \pm 1\rangle_1 \otimes |j_2, \mu_2\rangle_2 , \quad (4.53)$$

és hasonlóan \mathbf{J}_2 -re. Az egyszerűbb írásmód kedvéért a tenzorszorzat Hilbert tér elemeinél elhagytuk a \otimes jelet. Hasonlóan járunk el az operátorokkal is, $J_{1,z} \otimes I_2$ helyett pl. $J_{1,z}$ -t írunk csak. Könnyen belátható, hogy az így definiált \mathbf{J}_1 és \mathbf{J}_2 operátorok felcserélhetőek egymással és összegük (még utoljára kiírva a \otimes jelet),

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 \otimes I_2 + I_1 \otimes \mathbf{J}_2 , \quad (4.54)$$

is vektoroperátor:

$$\begin{aligned} \mathbf{J} \times \mathbf{J} &= (\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2) \times (\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2) \\ &= \mathbf{J}_1 \times \mathbf{J}_1 + \underbrace{\mathbf{J}_1 \times \mathbf{J}_2 + \mathbf{J}_2 \times \mathbf{J}_1}_0 + \mathbf{J}_2 \times \mathbf{J}_2 \\ &= i\hbar \mathbf{J}_1 + i\hbar \mathbf{J}_2 = i\hbar \mathbf{J} . \end{aligned} \quad (4.55)$$

A korábbi tétel értelmében \mathbf{J} sajátfüggvényei és sajátértékei kielégítik a

$$\mathbf{J}^2 |j, \mu\rangle = \hbar^2 j(j + 1) |j, \mu\rangle , \quad J_z |j, \mu\rangle = \hbar \mu |j, \mu\rangle , \quad (4.56)$$

$$J_{\pm} |j, \mu\rangle = \hbar \sqrt{j(j + 1) - \mu(\mu \pm 1)} |j, \mu \pm 1\rangle , \quad (4.57)$$

$$|j, \mu\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 , \quad (4.58)$$

összefüggéseket. A következőkben megmutatjuk, hogy milyen $|j, \mu\rangle$ sajátfüggvények állíthatók elő *adott* j_1 és j_2 esetén a $|j_1, \mu_1\rangle_1 |j_2, \mu_2\rangle_2$ szorzatfüggvények lineárkombinációjaként, azaz

$$|j, \mu\rangle = \sum_{\mu_1, \mu_2} C(j_1 \mu_1, j_2 \mu_2 | j, \mu) |j_1, \mu_1\rangle_1 |j_2, \mu_2\rangle_2 . \quad (4.59)$$

alakban A $C(j_1 \mu_1, j_2 \mu_2 | j, \mu)$ együtthatókat, melyeket szokás $\langle j_1 \mu_1, j_2 \mu_2 | j, \mu \rangle$ -vel is jelölni, Clebsch-Gordan együtthatóknak nevezzük. Megállapodás szerint a Clebsch-Gordan együtthatókat valós értékűnek választjuk.

A J_z operátor hatása az (4.59) állapotra kifejezhető mint

$$\begin{aligned} J_z |j, \mu\rangle &= (J_{1,z} + J_{2,z}) \sum_{\mu_1, \mu_2} C(j_1 \mu_1, j_2 \mu_2 | j, \mu) |j_1, \mu_1\rangle_1 |j_2, \mu_2\rangle_2 \\ &= \sum_{\mu_1, \mu_2} \hbar(\mu_1 + \mu_2) C(j_1 \mu_1, j_2 \mu_2 | j, \mu) |j_1, \mu_1\rangle_1 |j_2, \mu_2\rangle_2 \\ &= \hbar(\mu_1 + \mu_2) |j, \mu\rangle , \end{aligned} \quad (4.60)$$

amiből

$$\mu = \mu_1 + \mu_2 \quad (4.61)$$

következik. Tehát azok a Clebsch-Gordan együtthatók, melyekre $\mu \neq \mu_1 + \mu_2$, bizonyosan zérussal egyeznek meg. Ebből az is következik, hogy *adott* j_1 és j_2 mellett μ maximálisan a $j_1 + j_2$ értéket veheti föl, ezért j sem lehet ennél nagyobb, azaz $j > j_1 + j_2$ esetén $C(j_1\mu_1, j_2\mu_2|j, \mu)$ ugyancsak nulla.

4.3. Tétel

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_1\rangle_1 |j_2, j_2\rangle_2, \quad (4.62)$$

azaz,

$$C(j_1j_1, j_2j_2|j_1 + j_2, j_1 + j_2) = 1. \quad (4.63)$$

Bizonyítás. Egyrészt

$$\begin{aligned} J_z |j_1, j_1\rangle_1 |j_2, j_2\rangle_2 &= (J_{1,z} + J_{2,z}) |j_1, j_1\rangle_1 |j_2, j_2\rangle_2 \\ &= \hbar(j_1 + j_2) |j_1, j_1\rangle_1 |j_2, j_2\rangle_2, \end{aligned} \quad (4.64)$$

másrészt a

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 &= (\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2)^2 = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2\mathbf{J}_1\mathbf{J}_2 \\ &= \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2J_{1,z}J_{2,z} + J_{1,+}J_{2,-} + J_{1,-}J_{2,+}, \end{aligned} \quad (4.65)$$

azonosság felhasználásával,

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 |j_1, j_1\rangle_1 |j_2, j_2\rangle_2 &= \hbar^2(j_1(j_1 + 1) + j_2(j_2 + 1) + 2j_1j_2) |j_1, j_1\rangle_1 |j_2, j_2\rangle_2 \\ &\quad + \underbrace{J_{1,+}|j_1, j_1\rangle_1}_{|j_0^1\rangle} J_{2,-}|j_2, j_2\rangle_2 + J_{1,-}|j_1, j_1\rangle_1 \underbrace{J_{2,+}|j_2, j_2\rangle_2}_{|j_0^2\rangle} \\ &= \hbar^2(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1) |j_1, j_1\rangle_1 |j_2, j_2\rangle_2, \end{aligned} \quad (4.66)$$

ahol $|j_0^i\rangle$ a \mathcal{H}_i Hilbert-tér nulleleme. □

Vezessük be a $j_{\max} = j_1 + j_2$ jelölést. Nyilvánvaló, hogy $J_- = J_{1,-} + J_{2,-}$ operátor szukcesszív hattanásával a $|j_{\max}, j_{\max}\rangle$ állapotból kiindulva, a $|j_{\max}, \mu\rangle$ ($\mu = -j_{\max}, -j_{\max} + 1, \dots, j_{\max} - 1$) állapotok előállíthatók.

4.4. Példa

$$J_- |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = \hbar\sqrt{2(j_1 + j_2)} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle \quad (4.67)$$

$$(J_{1,-} + J_{2,-}) |j_1, j_1\rangle_1 |j_2, j_2\rangle_2 = \hbar\sqrt{2j_1} |j_1, j_1 - 1\rangle_1 |j_2, j_2\rangle_2 + \hbar\sqrt{2j_2} |j_1, j_1\rangle_1 |j_2, j_2 - 1\rangle_2 \quad (4.68)$$

↓

$$\begin{aligned} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle &= \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1 - 1\rangle_1 |j_2, j_2\rangle_2 \\ &\quad + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1\rangle_1 |j_2, j_2 - 1\rangle_2, \end{aligned} \quad (4.69)$$

azaz

$$C(j_1, j_1 - 1; j_2 j_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1) = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}}, \quad (4.70)$$

valamint

$$C(j_1 j_1; j_2, j_2 - 1 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1) = \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}}. \quad (4.71)$$

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

$$|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle = c_1 |j_1, j_1 - 1\rangle_1 |j_2, j_2\rangle_2 + c_2 |j_1, j_1\rangle_1 |j_2, j_2 - 1\rangle_2 \quad (4.72)$$

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

$$c_1 \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} + c_2 \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} = 0 \quad (4.73)$$

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

$$c_1^2 + c_2^2 = 1 \quad (4.74)$$

feltételt is, amiből

$$c_1 = \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}}, \quad c_2 = -\sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} \quad (4.75)$$

adódik. Innen a $|j_1 + j_2 - 1, \mu\rangle$ ($\mu = -j_1 - j_2 + 1, \dots, j_1 + j_2 - 2$) állapotok J_- alkalmazásával nyerhetők, majd újabb ortogonalizálással léphetünk a $j = j_1 + j_2 - 2$ altérbe stb. Kérdés, hogy meddig folytatható ez az eljárás, azaz mi azon j_{\min} minimális sajátérték, melyhez tartozó altér sajátfüggvényei még kikeverhetők a $|j_1, \mu_1\rangle_1 |j_2, \mu_2\rangle_2$ állapotokból? Ezt a kérdést az alterek dimenziójának vizsgálatával könnyedén megválaszolhatjuk. A szorzatfüggvények nyilvánvalóan egy $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ dimenziójú alteret feszítenek ki. Ennek meg kell egyeznie a kikevert sajátfüggvények által kifeszített altér dimenziójával:

$$(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = \sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}=j_1+j_2} (2j + 1) = (j_1 + j_2 + 1)^2 - j_{\min}^2. \quad (4.76)$$

Innen

$$j_{\min}^2 = (j_1 + j_2 + 1)^2 - 4j_1 j_2 - 2(j_1 + j_2) - 1 \quad (4.77)$$

$$= (j_1 + j_2)^2 - 4j_1 j_2 = (j_1 - j_2)^2, \quad (4.78)$$

amiből

$$j_{\min} = |j_1 - j_2| \quad (4.79)$$

következik. Végeredményben tehát a \mathbf{J}^2 lehetséges sajátértékei $\hbar^2 j(j + 1)$, ahol

$$j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2. \quad (4.80)$$

Megjegyezzük még a Clebsch-Gordan együtthatók ortonormáltságára, teljességére vonatkozó relációkat:

$$\sum_{\mu_1=-j_1}^{j_1} \sum_{\mu_2=-j_2}^{j_2} C(j_1\mu_1; j_2\mu_2|j\mu) C(j_1\mu_1; j_2\mu_2|j'\mu') = \delta_{jj'} \delta_{\mu\mu'}, \quad (4.81)$$

és

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{\mu=-j}^j C(j_1\mu_1; j_2\mu_2|j\mu) C(j_1\mu'_1; j_2\mu'_2|j\mu) = \delta_{\mu_1\mu'_1} \delta_{\mu_2\mu'_2}. \quad (4.82)$$

4.2. Feladatok

4.2.1. Példák

4.1. Feladat Lássuk be az $L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\varphi}$ operátor önadjungáltságát az $\{f \mid f \in \mathcal{L}^2[0, 2\pi], f(0) = f(2\pi)\}$ halmazon!

4.2. Feladat A 3.9. példa megoldása során megmutatjuk, hogy $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ csererelációból következően bármely állapotban,

$$\Delta L_x \Delta L_y \geq \frac{\hbar}{2} |\langle L_z \rangle| .$$

Tekintsük az L_z operátor zérus sajátértékhez tartozó sajátállapotát, $L_z |\psi\rangle = 0$. Csupán a léptetőoperátorok használatával és a csererelációk segítségével mutassuk meg, hogy

$$\Delta L_x \Delta L_y = 0$$

csak abban az esetben teljesülhet, ha egyúttal

$$L_x |\psi\rangle = L_y |\psi\rangle = 0 \implies L^2 |\psi\rangle = 0 !$$

4.3. Feladat Számítsuk ki $\ell = 1$ esetben az L^2 és L_z operátorok bázisában az L_y és L_x operátorok mátrixát! Mutassuk meg, hogy az így kapott 3×3 -as mátrixok kielégítik az impulzusmomentum felcserélési relációit!

4.4. Feladat Számítsuk ki az $U(\varphi) = e^{i\varphi L_x/\hbar}$ forgatásmátrixot $\ell = 1$ esetben az L^2 és L_z operátorok bázisában!

4.5. Feladat Bizonyítsa be, hogy

$$[L_i, f(\mathbf{r})] = \frac{\hbar}{i} (\mathbf{r} \times \nabla f(\mathbf{r}))_i ,$$

ahol L_i az impulzus momentum operátor i -k komponense ($i = x, y, z$) és $f(\mathbf{r})$ egy differenciálható függvény. Mi következik ebből egy, csak a radiális koordinátától függő, $f(r)$ függvényre?

Segítség: Bizonyítsa, hogy $[p_i, f(\mathbf{r})] = \frac{\hbar}{i} \nabla_i f(\mathbf{r})$

4.6. Feladat Az impulzus és koordinátaoperátorok felcserélési relációi alapján lássa be két dimenzióban a következő összefüggést,

$$p^2 = \frac{1}{r^2} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2 + \frac{L^2}{r^2} . \quad (4.83)$$

4.7. Feladat A léptető operátorok segítségével konstruáljuk meg a 2×2 Pauli-mátrixokat!

4.8. Feladat Diagonalizáljuk a $\sigma \cdot \mathbf{n}$ mátrixot, ahol \mathbf{n} egy egységvektor! Írjuk fel a diagonalizáció transzformációjának mátrixát?

4.9. Feladat Határozzuk meg a Clebsch-Gordan együtthatókat két feles spinű részecske spinjének az összeadása esetén!

4.10. Feladat Vizsgálja meg a következő impulzusmomentumok összeadási szabályait, és határozza meg a Clebsch-Gordan együtthatókat!

a) $L = 1$ és $S = 1/2$

b) $L = 1$ és $S = 1$

4.11. Feladat Határozzuk meg egy általános \mathbf{L} pályamomentum és egy feles spinmomentum (\mathbf{S}) összeadásakor alkalmazandó Clebsch-Gordon együtthatókat!

Segítség: Induljunk ki a legmasabb impulzusmomentumú állapotból, és haddassuk n -szer az $(L_- + S_-)$ operátort, és használjuk ki, hogy feles spin esetén $S_-^2 = 0$.

4.12. Feladat Határozzuk meg az $L = 1$ és $S = 1/2$ impulzusmomentumok összeadásából származtatható, $J = 1/2$ és $m_J = 1/2$ kvantumszámokkal jellemzett állapotban az L_z várható értékét!

4.13. Feladat Adja meg két elektron $S = 1$ és $m_S = 0$ kvantumszámokkal jellemzett közös spin sajátállapotában az egyik elektron spinjének $\langle S_1^x \rangle$, $\langle S_1^y \rangle$ és $\langle S_1^z \rangle$ várható értékeit! Mekkora az $\langle S_1^2 \rangle$ várható érték?

4.14. Feladat Mutassa meg, hogy a spin-pálya kölcsönhatást is tartalmazó

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \lambda \mathbf{L} \mathbf{S} \quad (4.84)$$

Hamiltonoperátor esetén a $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ összipulzusmomentum bármely komponense mozgásállandó, amennyiben a potenciál gömbszimmetrikus, azaz $V(\mathbf{r}) = V(r)$!

4.2.2. Megoldások

4.1 Megoldás Be kell bizonyítanunk a következő állítást:

$$\langle g | L_z f \rangle = \langle L_z g | f \rangle .$$

A skalár szorzatot a következőképpen írhatjuk fel:

$$\langle g | L_z f \rangle = \int_0^{2\pi} g^* \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\varphi} f d\varphi = \frac{\hbar}{i} g^* f \Big|_0^{2\pi} - \int_0^{2\pi} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\varphi} g^* \right) f d\varphi .$$

Miután az f függvény periodikus 2π -re, a parciális integrálás után kapott első tag eltűnik. Tehát a szimmetrikusság feltétele teljesül:

$$\langle g | L_z f \rangle = - \int_0^{2\pi} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\varphi} g^* \right) f d\varphi = \int_0^{2\pi} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\varphi} g \right)^* f d\varphi = \langle L_z g | f \rangle .$$

Ahhoz, hogy a szimmetrikusság teljesüljön nem kell, hogy $g(0) = g(2\pi)$ teljesüljön, így elsőre úgy tűnhet, hogy L_z csak szimmetrikus, de nem önadjungált. g periodicitása azonban fizikailag világos, miután változója a φ szögváltozó, így $\mathcal{D}(L_z) = \mathcal{D}(L_z^\dagger)$, tehát az $L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\varphi}$ operátor önadjungált.

4.2 Megoldás

Az egyenlőséghez az kell, hogy

$$(L_x - \langle L_x \rangle) |\psi\rangle = K (L_y - \langle L_y \rangle) |\psi\rangle , \quad (4.85)$$

valamely $K \in \mathbb{C}$ számra.

Először azt látjuk be, hogy $L_z |\psi\rangle = 0$ esetén $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$. A (4.13) egyenlet alapján tudjuk, hogy

$$[L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm} ,$$

ezért

$$L_z L_{\pm} |\psi\rangle = L_{\pm} L_z |\psi\rangle \pm \hbar L_{\pm} |\psi\rangle = \pm \hbar L_{\pm} |\psi\rangle ,$$

és

$$L_x = \frac{1}{2} (L_+ + L_-) , \quad L_y = \frac{1}{2i} (L_+ - L_-)$$

miatt

$$L_z L_x |\psi\rangle = \frac{1}{2} (L_z L_+ + L_z L_-) |\psi\rangle = \frac{\hbar}{2} (L_+ - L_-) |\psi\rangle = i \hbar L_y |\psi\rangle ,$$

és

$$L_z L_y |\psi\rangle = \frac{1}{2i} (L_z L_+ - L_z L_-) |\psi\rangle = \frac{\hbar}{2i} (L_+ + L_-) |\psi\rangle = -i \hbar L_x |\psi\rangle .$$

Ezért aztán

$$\langle L_x \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | L_z L_y |\psi\rangle = 0$$

és

$$\langle L_y \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle \psi | L_z L_x |\psi\rangle = 0 .$$

A (4.85) feltétel tehát

$$L_x |\psi\rangle = K L_y |\psi\rangle \quad (4.86)$$

alakra egyszerűsödik.

Definiáljuk a

$$|\psi_{\pm}\rangle = L_{\pm} |\psi\rangle$$

függvényeket, melyek az L_z operátor (nem normált) sajátfüggvényei, $\pm \hbar$ sajátértékekkel, ezért ortogonálisak egymásra. A (4.86) felhasználásával a

$$\frac{1}{2} |\psi_+\rangle + \frac{1}{2} |\psi_-\rangle = \frac{K}{2i} |\psi_+\rangle - \frac{K}{2i} |\psi_-\rangle$$

egyenlőséghez jutunk, mely a $K = i$ és $K = -i$ egyenletek szinonim teljesülését feltételezi, ami ellentmondás.

Az ellentmondás csak úgy oldható fel, hogy

$$L_{\pm} |\psi\rangle = 0 \implies L_x |\psi\rangle = L_y |\psi\rangle = 0 .$$

4.3 Megoldás Használjuk fel a 3.8. számú feladatban szereplő összefüggést az impulzusmomentum operátor x és y komponense és az L_+ , L_- léptető operátorok között:

$$L_x = \frac{1}{2} (L_+ + L_-) , \quad L_y = \frac{1}{2i} (L_+ - L_-) .$$

A mátrixelemek a következők lesznek:

$$\begin{aligned}\langle \ell, m | L_x | \ell', m' \rangle &= \frac{\hbar}{2} \langle \ell, m | L_+ + L_- | \ell', m' \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2} \delta_{\ell, \ell'} \left(\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)} \delta_{m-1, m'} + \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)} \delta_{m+1, m'} \right)\end{aligned}$$

Hasonlóan határozhatjuk meg az y komponens mátrixelemeit is:

$$\langle \ell, m | L_y | \ell', m' \rangle = \frac{\hbar}{2i} \delta_{\ell, \ell'} \left(\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)} \delta_{m-1, m'} - \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)} \delta_{m+1, m'} \right)$$

A kapott képleteket alkalmazzuk az $\ell = 1$ -es altérre:

$$L_x = \frac{\sqrt{2}}{2} \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_y = \frac{\sqrt{2}}{2} \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

Számítsuk ki a felcsrlési relációkat:

$$\begin{aligned}[L_x, L_y] &= \frac{\hbar^2}{2} \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \right) \\ &= i\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = i\hbar L_z\end{aligned}$$

4.4 Megoldás A 4.3. feladat L_x mátrixát felhasználva az operátort spektrálfelbontása segítségével állítjuk elő. Előbb határozzuk meg L_x sajátvektorait az $\ell = 1$ altéren, a sajátértékei nyilvánvalóan az $1, 0, -1$ értékek lesznek. A sajátvektorokból, mint oszlopvektorokból felépített mátrix a következő:

$$V = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

A forgatásmátrixot a következő alakba írhatjuk:

$$\begin{aligned}U(\varphi) &= V e^{i\varphi m} V^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\varphi} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\varphi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \varphi) & \frac{i}{\sqrt{2}} \sin \varphi & \frac{1}{2}(1 - \cos \varphi) \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \sin \varphi & \cos \varphi & -\frac{i}{\sqrt{2}} \sin \varphi \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \varphi) & -\frac{i}{\sqrt{2}} \sin \varphi & \frac{1}{2}(1 + \cos \varphi) \end{pmatrix}\end{aligned}$$

4.5 Megoldás Bizonyítsuk, hogy $[p_i, f(\mathbf{r})] = \frac{\hbar}{i} \nabla_i f(\mathbf{r})$:

$$[p_i, f(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{i} (\nabla_i (f(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})) - f(\mathbf{r})\nabla_i \psi(\mathbf{r})) = \frac{\hbar}{i} (\nabla_i f(\mathbf{r})) \psi(\mathbf{r}) \quad (4.87)$$

Használjuk fel az impulzusmomentum definícióját:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}, \quad L_i = \epsilon_{ijk} r_j p_k,$$

ahol minden kétszer szereplő indexre összegzünk.

$$[L_i, f(\mathbf{r})] = \epsilon_{ijk} [r_j p_k, f(\mathbf{r})] = \epsilon_{ijk} (r_j [p_k, f(\mathbf{r})] + [r_j, f(\mathbf{r})] p_k).$$

A második tagban szereplő $[r_j, f(\mathbf{r})]$ kommutátor nyilvánvalóan eltűnik, így a felcserélési relációt a következő alakba írhatjuk:

$$[L_i, f(\mathbf{r})] = \frac{\hbar}{i} \epsilon_{ijk} r_j \nabla_k f(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{i} (\mathbf{r} \times \nabla f(\mathbf{r}))_i. \quad (4.88)$$

Ha az $f(r)$ multiplikatív operátor csak r -től függ, a gradiensét a láncszabály szerint képezhetjük:

$$\frac{\partial f(r)}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{\partial f(r)}{\partial r}$$

Nyilvánvalóan a (4.88) felcserélési reláció eltűnik, hiszen $\mathbf{r} \times \mathbf{r} = 0$, vagyis ebben \mathbf{L} minden komponense felcserélhető az $f(r)$ operátorral.

4.6 Megoldás Az impulzusmomentumnak csak z komponense van két dimenzióban:

$$L_z = r_x p_y - r_y p_x.$$

Írjuk fel a négyzetét:

$$\begin{aligned} L_z^2 &= r_x p_y r_x p_y + r_y p_x r_y p_x - r_x p_y r_y p_x - r_y p_x r_x p_y \\ &= r_x^2 p_y^2 + r_y^2 p_x^2 - r_x p_x r_y p_y - r_x p_x \frac{\hbar}{i} - r_y p_y r_x p_x - r_y p_y \frac{\hbar}{i} \end{aligned}$$

Az előző kifejtésben felhasználtuk az impulzus és a koordináta operátorra vonatkozó felcserélési relációkat. Írjuk fel a bizonyítandó egyenlőség bal oldalát:

$$\begin{aligned} r^2 p^2 - (\mathbf{rp})^2 &= (r_x^2 + r_y^2)(p_x^2 + p_y^2) - (r_x p_x + r_y p_y)(r_x p_x + r_y p_y) \\ &= r_x^2 p_x^2 + r_y^2 p_y^2 + r_x^2 p_y^2 + r_y^2 p_x^2 \\ &\quad - r_x p_x r_x p_x - r_y p_y r_y p_y - r_x p_x r_y p_y - r_y p_y r_x p_x \end{aligned}$$

Használjuk ki a fenti egyenletben is a felcserélési relációkat:

$$\begin{aligned} r^2 p^2 - (\mathbf{rp})^2 &= r_x^2 p_x^2 + r_y^2 p_y^2 + r_x^2 p_y^2 + r_y^2 p_x^2 \\ &\quad - r_x^2 p_x^2 - \frac{\hbar}{i} r_x p_x - r_y^2 p_y^2 - \frac{\hbar}{i} r_y p_y - r_x p_x r_y p_y - r_y p_y r_x p_x \\ &= r_x^2 p_y^2 + r_y^2 p_x^2 - r_x p_x r_y p_y - r_y p_y r_x p_x - \frac{\hbar}{i} r_x p_x - \frac{\hbar}{i} r_y p_y \end{aligned}$$

A fenti egyenletet összevetve L_z^2 kifejtésével megállapíthatjuk, hogy

$$L_z^2 = r^2 p^2 - (\mathbf{rp})^2$$

teljesül, ami nem más, mint a bizonyítandó feltevés.

4.7 Megoldás Az \mathbf{S} spin operátorok között ugyanaz a felcserélési reláció, mint az impulzus momentum komponensei között. Az L_+ , L_- léptető operátorok származtatása során csak a kommutációs szabályokat használtuk fel, ezért az $S_+ = S_x + iS_y$, $S_- = S_x - iS_y$ hatása is megegyezik az L_+ , L_- operátorok hatásával:

$$\begin{aligned} S_+|S, m_S\rangle &= \hbar\sqrt{s(s+1) - m_S(m_S+1)}|S, m_S+1\rangle, \\ S_-|S, m_S\rangle &= \hbar\sqrt{s(s+1) - m_S(m_S-1)}|S, m_S-1\rangle. \end{aligned}$$

A szabályt alkalmazzuk az $S = 1/2$ altérre:

$$\begin{aligned} S_+|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= 0 & S_+|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= \hbar|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ S_-|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= \hbar|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle & S_-|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= 0. \end{aligned}$$

A fenti összefüggések segítségével egyszerűen megszerkeszthetjük az S_+ és S_- operátorok mátrixát az altéren:

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

A spin operátor komponensei előállíthatóak a léptető operátorok felhasználásával:

$$S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

az S_z operátor nyilvánvalóan diagonális lesz ezen a bázison:

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Tudjuk, hogy a spin operátorok egyszerűen kifejezhetőek a Pauli mátrixokkal: $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$, amelyek a fenti mátrixokból leolvashatóak.

4.8 Megoldás Használjuk fel a Pauli mátrixok szorzatainak a tulajdonságait:

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}\mathbb{1} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k,$$

ahol $\mathbb{1}$ a 2×2 -es egységmátrixot jelöl. Számítsuk ki $\boldsymbol{\sigma n}$ négyzetét:

$$(\boldsymbol{\sigma n})^2 = \sigma_i n_i \sigma_j n_j = n_i n_j (\delta_{ij}\mathbb{1} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k) = \mathbb{1} + i(\mathbf{n} \times \mathbf{n})\boldsymbol{\sigma}.$$

A második tag természetesen eltűnik, tehát $(\boldsymbol{\sigma n})^2 = \mathbb{1}$. Vezessük be a következő projektort:

$$P_{\pm} = \frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \boldsymbol{\sigma n}).$$

Könnyen beláthatjuk, hogy $P_{\pm}^2 = P_{\pm}$:

$$P_{\pm}^2 = \frac{1}{4}(\mathbb{1} \pm 2\boldsymbol{\sigma n} + \mathbb{1}) = P_{\pm}$$

Hasonlóan ellenőrizhetjük, hogy $P_+P_- = 0$:

$$P_+P_- = \frac{1}{4}(\mathbb{1} + \boldsymbol{\sigma n})(\mathbb{1} - \boldsymbol{\sigma n}) = \frac{1}{4}(\mathbb{1} - (\boldsymbol{\sigma n})^2) = 0.$$

Belátjuk, hogy a P_{\pm} projektor egy alkalmasan választott \mathbf{u} vektorból $\sigma \mathbf{n}$ sajátvektorait vetíti ki:

$$\begin{aligned}\sigma \mathbf{n} P_+ \mathbf{u} &= \sigma \mathbf{n} \frac{1}{2} (\mathbb{1} + \sigma \mathbf{n}) \mathbf{u} = \frac{1}{2} (\mathbb{1} + \sigma \mathbf{n}) \mathbf{u} = P_+ \mathbf{u} \\ \sigma \mathbf{n} P_- \mathbf{u} &= \sigma \mathbf{n} \frac{1}{2} (\mathbb{1} - \sigma \mathbf{n}) \mathbf{u} = -\frac{1}{2} (\mathbb{1} - \sigma \mathbf{n}) \mathbf{u} = -P_- \mathbf{u} .\end{aligned}$$

Természetesen a $P_+ \mathbf{u}$, $P_- \mathbf{u}$ vektorok ortogonálisak egymásra. A Pauli mátrixok ismeretében írjuk fel a P_{\pm} projektorokat:

$$P_+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos(\vartheta) & \sin(\vartheta)e^{-i\varphi} \\ \sin(\vartheta)e^{i\varphi} & 1 + \cos(\vartheta) \end{pmatrix}, \quad P_- = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - \cos(\vartheta) & -\sin(\vartheta)e^{-i\varphi} \\ -\sin(\vartheta)e^{i\varphi} & 1 - \cos(\vartheta) \end{pmatrix},$$

ahol az \mathbf{n} egységvektor komponensei $(\sin(\vartheta) \cos(\varphi), \sin(\vartheta) \sin(\varphi), \cos(\vartheta))$.

A normált sajátvektorok az $\mathbf{u} = (1, 0)$ választással a következők lesznek:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_+ &= \frac{1}{\sqrt{(1 + \cos(\vartheta))^2 + \sin^2(\vartheta)}} \begin{pmatrix} 1 + \cos(\vartheta) \\ \sin(\vartheta)e^{i\varphi} \end{pmatrix} = \frac{1}{2 \cos(\frac{\vartheta}{2})} \begin{pmatrix} 2 \cos^2(\frac{\vartheta}{2}) \\ 2 \sin(\frac{\vartheta}{2}) \cos(\frac{\vartheta}{2}) e^{i\varphi} \end{pmatrix} \\ \mathbf{v}_+ &= \begin{pmatrix} \cos(\frac{\vartheta}{2}) \\ \sin(\frac{\vartheta}{2}) e^{i\varphi} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Hasonlóan határozhatjuk meg a másik sajátvektort is:

$$\mathbf{v}_- = \begin{pmatrix} \sin(\frac{\vartheta}{2}) e^{-i\varphi} \\ \cos(\frac{\vartheta}{2}) \end{pmatrix}$$

A transzformációs mátrixot a két sajátvektorból építhetjük fel:

$$\begin{pmatrix} \cos(\frac{\vartheta}{2}) & \sin(\frac{\vartheta}{2}) e^{-i\varphi} \\ \sin(\frac{\vartheta}{2}) e^{i\varphi} & \cos(\frac{\vartheta}{2}) \end{pmatrix}$$

4.9 Megoldás Az impulzus momentumok összeadásakor a következők szerint járunk el. Ha l_1 és l_2 impulzusmomentumokat adunk össze, akkor a legmagasabb (legalacsonyabb) $J_z = L_{1z} + L_{2z}$ sajátértékű sajátállapot előállítására egyértelmű:

$$|l_1 + l_2, l_1 + l_2\rangle = |l_1, l_1\rangle |l_2, l_2\rangle, \quad |l_1 + l_2, -(l_1 + l_2)\rangle = |l_1, -l_1\rangle |l_2, -l_2\rangle, \quad (4.89)$$

tehát $C(l_1 l_1, l_2 l_2 | l_1 + l_2, l_1 + l_2) = C(l_1 - l_1, l_2 - l_2 | l_1 + l_2, -(l_1 + l_2)) = 1$. Mindkét oldalra alkalmazzuk a lefelé léptető operátorokat:

$$\begin{aligned}J_- |1, 1\rangle &= (S_{1-} + S_{2-}) \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \sqrt{1(1+1) - 1(1-1)} |1, 0\rangle &= \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - 1 \right)} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ &+ \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - 1 \right)} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \sqrt{2} |1, 0\rangle &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle\end{aligned}$$

Tehát $C(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | 1, 0) = C(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | 1, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Az $|0, 0\rangle$ állapot ugyanazokat a direkt szorzatokat tartalmazza, mint az előző $|1, 0\rangle$ állapot. A két állapotnak ortogonálisnak kell lennie egymásra, ebből következik:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle,$$

vagyis $C(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | 0, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $C(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | 0, 0) = -\frac{1}{\sqrt{2}}$.

4.10 Megoldás a.) Induljunk a legmagasabb J_z sajátértékű állapotból, és alkalmazzuk a J_z , $(L_- + S_-)$ léptető operátorokat:

	$J = 3/2 \ M$		$ L, m\rangle S, m_S\rangle$		$ L, m\rangle S, m_S\rangle$
1	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$	1	$ 1, 1\rangle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$		
$\sqrt{3}$	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$\sqrt{2}$	$ 1, 0\rangle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	1	$ 1, 1\rangle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$2\sqrt{3}$	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$\sqrt{2}\sqrt{2}$	$ 1, -1\rangle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$2\sqrt{2}$	$ 1, 0\rangle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$\sqrt{3}2\sqrt{3}$	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$	6	$ 1, -1\rangle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$		

Foglaljuk össze a kapott Clebsh-Gordan együtthatókat:

$ J, M\rangle$		$ L, m\rangle S, m_S\rangle$		$ L, m\rangle S, m_S\rangle$
$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$	1	$ 1, 1\rangle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$		
$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$ 1, 0\rangle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$ 1, 1\rangle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$ 1, -1\rangle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$ 1, 0\rangle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$	1	$ 1, -1\rangle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$		

Az $|\frac{1}{2}, M\rangle$ altér megkonstruálásához a \mathbf{J}^2 sajátállapotok ortogonalitását kell kihasználnunk:

$ J, M\rangle$		$ L, m\rangle S, m_S\rangle$		$ L, m\rangle S, m_S\rangle$
$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$ 1, 0\rangle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}$	$ 1, 1\rangle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$ 1, -1\rangle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$-\sqrt{\frac{1}{3}}$	$ 1, 0\rangle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$

b.) Ebben az esetben nagyobb lesz az alterünk:

$J = 3/2 \ M$		$ L, m\rangle S, m_S\rangle$		$ L, m\rangle S, m_S\rangle$		$ L, m\rangle S, m_S\rangle$	
1	$ 2, 2\rangle$	1	$ 1, 1\rangle 1, 1\rangle$				
2	$ 2, 1\rangle$	$\sqrt{2}$	$ 1, 0\rangle 1, 1\rangle$	$\sqrt{2}$	$ 1, 1\rangle 1, 0\rangle$		
$2\sqrt{6}$	$ 2, 0\rangle$	$\sqrt{2}\sqrt{2}$	$ 1, -1\rangle 1, 1\rangle$	$2\sqrt{2}\sqrt{2}$	$ 1, 0\rangle 1, 0\rangle$	$\sqrt{2}\sqrt{2}$	$ 1, 1\rangle 1, -1\rangle$

A sajátállapotok normálása után a $J = 2$ alterünk együtthatói a következők lesznek:

$J = 3/2 \ M$		$ L, m\rangle S, m_S\rangle$		$ L, m\rangle S, m_S\rangle$		$ L, m\rangle S, m_S\rangle$
$ 2, 2\rangle$	1	$ 1, 1\rangle 1, 1\rangle$				
$ 2, 1\rangle$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$ 1, 0\rangle 1, 1\rangle$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$ 1, 1\rangle 1, 0\rangle$		
$ 2, 0\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$ 1, -1\rangle 1, 1\rangle$	$\frac{2}{\sqrt{6}}$	$ 1, 0\rangle 1, 0\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$ 1, 1\rangle 1, -1\rangle$

A $J = 1$ altér esetében az $|2, 1\rangle$ állapotnak merőlegesnek kell lennie a $|1, 1\rangle$ állapotra:

$$|1, 1\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}|1, 0\rangle|1, 1\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2}|1, 1\rangle|1, 0\rangle .$$

Ha a fenti sajátállapotra a J_- , $(L_- + S_-)$ léptető operátorokkal hatunk, az $|1, 0\rangle$ állapotra a következő lineáris kombináció adódik:

$$|1, 0\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}|1, -1\rangle|1, 1\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2}|1, 1\rangle|1, -1\rangle .$$

Az $|2, 0\rangle$, $|1, 0\rangle$, $|0, 0\rangle$ állapotoknak ortogonálisoknak kell lenniük egymásra. Ebből a feltételből egyszerűen megszerkeszthető a $|0, 0\rangle$ állapot:

$$|0, 0\rangle = \frac{\sqrt{3}}{3}|1, -1\rangle|1, 1\rangle - \frac{\sqrt{3}}{3}|1, 0\rangle|1, 0\rangle + \frac{\sqrt{3}}{3}|1, 1\rangle|1, -1\rangle .$$

4.11 Megoldás Az együtthatók meghatározásakor hasonlóan járunk el az előző feladatokhoz: felírjuk a legmagasabb J_z sajátértékű $|\ell + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2}\rangle$ állapotot és lefelé léptetjük az J_- illetve $L_- + S_-$ operátorokkal. Vagyis:

$$J_- \left| \ell + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2} \right\rangle = (L_- + S_-)^n |\ell, \ell\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle .$$

Fejtsük ki a jobboldalon az operátorok összegének n -ik hatványát és használjuk ki, hogy $S_-^2 = 0$, vagyis csak azok a tagok maradnak meg, amelyek S_- nulladik és első rendű tagját tartalmazzák:

$$(L_- + S_-)^n = L_-^n + nS_-L_-^{n-1} ,$$

tehát

$$J_-^n \left| \ell + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2} \right\rangle = L_-^n |\ell, \ell\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + nL_-^{n-1} |\ell, \ell\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle . \quad (4.90)$$

Az operátor hatványok hatásának meghatározásához hattassuk a lefelé léptető operátort a $|\ell, \ell - k\rangle$ állapotra:

$$L_- |\ell, \ell - k\rangle = \sqrt{\ell(\ell + 1) - (\ell - k)(\ell - k - 1)} |\ell, \ell - k - 1\rangle = \sqrt{(k + 1)(2\ell - k)} |\ell, \ell - k - 1\rangle .$$

Most térjünk vissza a (4.90) számú egyenletre és helyettesítsük be az előző képleteket:

$$\begin{aligned} \prod_{k=1}^n \sqrt{k(2\ell + 2 - k)} \left| \ell + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2} - n \right\rangle &= \prod_{k=1}^n \sqrt{k(2\ell + 1 - k)} |\ell, \ell - n\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ &+ \prod_{k=1}^{n-1} \sqrt{k(2\ell + 1 - k)} |\ell, \ell + 1 - n\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left| \ell + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2} - n \right\rangle &= \sqrt{\prod_{k=1}^n \frac{k(2\ell + 1 - k)}{k(2\ell + 2 - k)}} |\ell, \ell - n\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ &+ \frac{n}{\sqrt{n(2\ell + 1)}} \sqrt{\prod_{k=1}^{n-1} \frac{k(2\ell + 1 - k)}{k(2\ell + 2 - k)}} |\ell, \ell + 1 - n\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

Az előző kifejezésben a számláló mindig eggyel kisebb mint a nevező, így a produktumból csak a nevező első tagja és a számláló utolsó tagja marad meg:

$$\left| \ell + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2} - n \right\rangle = \sqrt{\frac{2\ell + 1 - n}{2\ell + 1}} |\ell, \ell - n\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{n}{2\ell + 1}} |\ell, \ell + 1 - n\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

Az $|\ell - \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2} - n\rangle$ állapot együtthatóit az ortogonalitás feltétel segítségével határozhatjuk meg:

$$\left| \ell - \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2} - n \right\rangle = \sqrt{\frac{n}{2\ell + 1}} |\ell, \ell - n\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{2\ell + 1 - n}{2\ell + 1}} |\ell, \ell + 1 - n\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle .$$

4.12 Megoldás A 4.11. feladat alapján az $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ állapotot a következő direktszorzat állapotokból tudjuk előállítani:

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 0\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 1\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle .$$

Az L_z várható érték tehát:

$$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| L_z \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{3} \langle 1, 0 | L_z | 1, 0 \rangle \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{2}{3} \langle 1, 1 | L_z | 1, 1 \rangle \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{2}{3} \hbar$$

4.13 Megoldás Az $|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle + |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle)$ állapotban tetszőleges, az első részecskére ható operátor várható értékét a következőképpen írhatjuk fel:

$$\langle 1, 0 | A_1 | 1, 0 \rangle = \frac{1}{2} \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| A_1 \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{2} \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| A_1 \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle .$$

Ez alapján a várható értékek:

$$\langle 1, 0 | S_{1z} | 1, 0 \rangle = \frac{1}{2} \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| S_z \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{2} \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| S_z \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{2} - \frac{\hbar}{2} \right) = 0$$

$$\langle 1, 0 | S_{1x} | 1, 0 \rangle = \frac{1}{2} \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| S_x \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{2} \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| S_x \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = 0$$

$$\langle 1, 0 | S_{1y} | 1, 0 \rangle = \frac{1}{2} \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| S_y \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{2} \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| S_y \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = 0$$

Az \mathbf{S}_1 operátor minden komponensének a várható értéke nulla az adott állapotban, de az \mathbf{S}_1^2 operátor várható értéke, hasonló számítások eredményeképpen,

$$\langle 1, 0 | \mathbf{S}_1^2 | 1, 0 \rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 . \quad (4.91)$$

4.14 Megoldás Az \mathbf{LS} csatolást felírhatjuk az $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ négyzetének a segítségével:

$$\mathbf{LS} = \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) .$$

A teljes Hamilton operátort a következőképpen fejezhetjük ki:

$$H = H_0 + \frac{\lambda}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) .$$

A H_0 operátor a gömbszimmetria miatt nyilvánvalóan felcserélhető \mathbf{L} és \mathbf{S} minden komponensével, ebből következően a \mathbf{J} operátorral is. Ezen felül

$$[\mathbf{L}^2, \mathbf{J}] = [\mathbf{S}^2, \mathbf{J}] = 0 ,$$

vagyis \mathbf{J} komponensei az \mathbf{LS} operátorral is felcserélhetőek, tehát \mathbf{J} mozgásállandó lesz.

5. fejezet

A hidrogénatom spektruma és a többtestprobléma

5.1. Elmélet

5.1.1. A radiális Schrödinger-egyenlet

Feladatunk, hogy $V(\mathbf{r}) = V(|\mathbf{r}|) = V(r)$ centrális potenciál esetén megoldjuk a

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) , \quad (5.1)$$

stacionárius Schrödinger egyenletet.

5.1. Tétel

$$\mathbf{p}^2 = p_r^2 + \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} , \quad (5.2)$$

ahol bevezettük a p_r radiális impulzust:

$$p_r \equiv \frac{1}{r} \mathbf{r} \mathbf{p} + \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} = \frac{\hbar}{i} \left(\partial_r + \frac{1}{r} \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \partial_r r . \quad (5.3)$$

Bizonyítás. A bizonyítás során felhasználunk néhány azonosságot, melyeket az 5.1., 5.2. illetve az 5.3. megoldásokban bizonyítunk. A hely- és impulzus operátorok felcserélési relációit kihasználva:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 &= L_i L_i = \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ilm} x_j p_k x_l p_m = (\delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}) x_j p_k x_l p_m \\ &= x_j p_k x_j p_k - x_j p_k x_k p_j = x_j \left(x_j p_k + \frac{\hbar}{i} \delta_{kj} \right) p_k - x_j p_k \left(p_j x_k - \frac{\hbar}{i} \delta_{kj} \right) \\ &= r^2 p^2 + 2 \frac{\hbar}{i} \underline{r} \underline{p} - x_j p_j p_k x_k = r^2 p^2 + 2 \frac{\hbar}{i} \underline{r} \underline{p} - x_j p_j x_k p_k - 3 \frac{\hbar}{i} x_j p_j \\ &= \mathbf{r}^2 \mathbf{p}^2 - (\mathbf{r} \mathbf{p})^2 - \frac{\hbar}{i} \mathbf{r} \mathbf{p} . \end{aligned} \quad (5.4)$$

Mivel a perdületoperátor bármely komponense, így a perdületoperátor négyzete is, felcserélhető r^2 -tel, a kapott azonosságot átírhatjuk a

$$\mathbf{p}^2 = \frac{1}{r^2} \left[(\mathbf{r} \mathbf{p})^2 - \frac{\hbar}{i} \mathbf{r} \mathbf{p} \right] + \frac{\mathbf{L}^2}{r^2}, \quad (5.5)$$

formába. Az (5.3) definíció alapján:

$$p_r^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{r} \partial_r r \right)^2 = -\hbar^2 \left[\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r \right] = -\hbar^2 \left(\frac{1}{r} \partial_r^2 r \right) \quad (5.6)$$

$$= -\hbar^2 \left[\frac{1}{r} \partial_r r \partial_r + \frac{1}{r} \partial_r \right] = -\frac{\hbar^2}{r^2} [r \partial_r r \partial_r + r \partial_r], \quad (5.7)$$

ami valóban az (5.5) egyenlet jobboldalának első tagja. \square

Felhasználva, hogy a perdületoperátor gömbi polárkoordináta reprezentációja nem tartalmazza az r radiális koordinátát, a

$$\left(\frac{p_r^2}{2m} + \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (5.8)$$

Schrödinger-egyenlet megoldását kereshetjük a

$$\psi(\mathbf{r}) = P(r) Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) \quad (5.9)$$

alakban, ahol $P(r)$ a radiális hullámfüggvény és az $Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)$ komplex gömbbharmonikusok az \mathbf{L}^2 és L_z operátorok közös sajátfüggvényei. Behelyettesítés után a $P(r)$ függvényre a

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \right] P(r) = EP(r) \quad (5.10)$$

differenciálegyenletet kapjuk. A radiális impulzus (5.6) alakját beírva és bevezetve az

$$R(r) = rP(r) \quad (5.11)$$

függvényt, a

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \right) R(r) = ER(r) \quad (5.12)$$

radiális Schrödinger egyenlethez jutunk.

5.1.2. A hidrogénatom kötött állapotai

Egy Z rendszámú atomban egy elektron potenciális energiája (az elektronok Coulomb tasztítását elhanyagolva)

$$V(r) = -\frac{kZe^2}{r} \quad \left(k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right). \quad (5.13)$$

Mivel $V(r) < 0$, a kötött állapotok negatív energiájúak: $E = -|E|$. Az (5.12) egyenletet ezért a következőképpen alakíthatjuk át,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} - \frac{Z\alpha}{r} + |E| \right) R(r) = 0, \quad (\alpha = ke^2) \quad (5.14)$$

↓

$$\left(\frac{\hbar^2}{8m|E|} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\hbar^2}{8m|E|} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{Z\alpha}{4r|E|} - \frac{1}{4} \right) R(r) = 0. \quad (5.15)$$

Bevezetve a

$$\xi = \frac{\sqrt{8m|E|}r}{\hbar} = \frac{2r}{r_0} \quad (5.16)$$

változót, ahol

$$r_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{2m|E|}}, \quad |E| = \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \quad (5.17)$$

és az

$$\varepsilon = \frac{Z\alpha}{2|E|r_0} = Zr_0 \frac{\alpha}{2|E|r_0^2} = Zr_0 \frac{m\alpha}{\hbar^2} = Z \frac{r_0}{a_0}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m\alpha} = \frac{\hbar^2}{kme^2}, \quad (5.18)$$

paramétereket, ahol $a_0 = 0.529 \times 10^{-10}$ m a Bohr sugár, a

$$\frac{d^2 R(\xi)}{d\xi^2} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{\varepsilon}{\xi} - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2} \right) R(\xi) = 0 \quad (5.19)$$

differenciálegyenlethez jutunk. (A változócsere után a némiképp pongyola, $R(\xi) = R(r(\xi))$ jelölést használtuk.) A fenti egyenlet megoldásait könnyen megtaláljuk az értelmezési tartomány, $\xi \in (0, \infty)$, aszimptotikus pontjaiban:

$\xi \rightarrow \infty$

$$\frac{d^2 R(\xi)}{d\xi^2} - \frac{1}{4} R(\xi) = 0 \implies R(\xi) \propto e^{-\frac{1}{2}\xi}, \quad (5.20)$$

$\xi \rightarrow 0$

$$\frac{d^2 R(\xi)}{d\xi^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2} R(\xi) = 0 \implies R(\xi) \propto \xi^{\ell+1}. \quad (5.21)$$

A (5.19) egyenlet megoldását, a *Sommerfeld-féle polinom módszer* szellemében, keressük az

$$R(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi} u(\xi) \quad (5.22)$$

alakban, melyet behelyettesítve az (5.19) egyenletbe az

$$u''(\xi) - u'(\xi) + \left(\frac{\varepsilon}{\xi} - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2} \right) u(\xi) = 0 \quad (5.23)$$

egyenlethez jutunk. A $\xi \rightarrow 0$ aszimptotika miatt célszerű a megoldást

$$u(\xi) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \xi^{i+s} \quad (5.24)$$

polinom alakban keresni, ahol s -et iniciális indexnek nevezik ($s > 1$). A szükséges deriválásokat elvégezve a következő egyenletrendszer nyerjük:

$$[s(s-1) - \ell(\ell+1)] c_0 \xi^{s-2} + \quad (5.25)$$

$$\sum_{i=1}^{\infty} \{[(i+s)(i+s-1) - \ell(\ell+1)] c_i - [(i+s-1) - \varepsilon] c_{i-1}\} \xi^{i+s-2} = 0, \quad (5.26)$$

mely tetszőleges ξ -re akkor teljesül, ha mindegyik hatványtag együtthatója eltűnik. A legkisebb kitevőjű hatványtag együtthatóját vizsgálva ($c_0 \neq 0$),

$$s(s-1) - \ell(\ell+1) = 0 \implies s = \begin{cases} \ell+1 \\ -\ell \end{cases}, \quad (5.27)$$

amiből nyilvánvalóan csak az $s = \ell+1$ választás szolgáltat az origóban reguláris megoldást. A többi hatványtag együtthatójából a

$$c_i = \frac{i + \ell - \varepsilon}{(i + \ell)(i + \ell + 1) - \ell(\ell + 1)} c_{i-1} = \frac{i + \ell - \varepsilon}{i(i + 2\ell + 1)} c_{i-1}, \quad (5.28)$$

$(i = 1, 2, \dots)$

rekurziós összefüggés adódik. Mivel a c_i/c_{i-1} hányados nagy i -re $1/i$ -hez tart, nagy ξ -re $u(\xi) \propto e^\xi$, következésképpen $R(\xi) \propto e^{\frac{1}{2}\xi}$, ami nyilvánvalóan divergens $\xi \rightarrow \infty$ esetén. Reguláris megoldást tehát csak úgy kapunk, ha $u(\xi)$ véges polinom, azaz létezik olyan $i_{\max} = 1, 2, \dots$, hogy $c_{i_{\max}-1} \neq 0$, viszont $c_{i_{\max}} = 0$. Ekkor

$$\varepsilon = i_{\max} + \ell. \quad (5.29)$$

Vezessük be az ún. *főkvantumszámot*

$$n = i_{\max} + \ell \implies n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.30)$$

mellyel az ℓ *mellékkvantumszám* az alábbi nyilvánvaló összefüggésben áll:

$$\ell = 0, 1, \dots, n - 1. \quad (5.31)$$

A kötött állapot radiális kiterjedését jellemző sugár,

$$r_0 = \frac{na_0}{Z}, \quad (5.32)$$

valamint a sajátenergia,

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2mr_0^2} = -\frac{\hbar^2 Z^2}{2ma_0^2 n^2} = -\frac{m(kZe^2)^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{kZe^2}{2a_0} \frac{1}{n^2}, \quad (5.33)$$

csak a főkvantumszámtól függenek. A hidrogénatom kötöttállapotú hullámfüggvényének teljes alakja:

$$\psi_{n\ell m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} L_{n\ell}(r/2r_0) e^{-r/r_0} Y_\ell^m(\vartheta, \varphi), \quad (5.34)$$

ahol $L_{n\ell}$ az ún. Laguerre polinomokat jelöli. A fentiekből következik, hogy az $L_{n\ell}$ polinom az $\ell + 1$ -ik hatvánnyal kezdődik és a legmagasabb hatványkitevője $(i_{\max} - 1) + (\ell + 1) =$

$i_{\max} + \ell = n$. Ezért a polinom $n - \ell$ (egymást követő) hatványtagot tartalmaz, tehát zérushelyeinek száma $n - \ell - 1$. Az energiaszintek degeneráltsága az m *mágneses kvantumszámra* való összegzéssel könnyen kiszámítható,

$$2 \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = 4 \frac{n(n-1)}{2} + 2n = 2n^2, \quad (5.35)$$

ahol egy kettes szorzófaktorral a spin-állapot ($m_s = \pm \frac{1}{2}$) szerinti degeneráltságot is figyelembe vettük.

5.1.3. Többrészecske rendszerek

Azonos részecskék rendszerének hullámfüggvénye

Valamely s -spinű részecske ψ_1 hullámfüggvénye koordináta-spin reprezentációban a $\mathcal{H}_1 = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^{2s+1}$ Hilbert-tér eleme:

$$\psi_1(1) \equiv \langle \psi_1 | (|\mathbf{r}_1\rangle \otimes |s, m_1^s\rangle) = \psi_1(\mathbf{r}_1, m_1^s), \quad (5.36)$$

N azonos részecske $\psi_N(1, 2, \dots, N)$ hullámfüggvényét a \mathcal{H}_1 Hilbert-tér N -szeres tenzor-szorzatán értelmezzük,

$$\psi_N \in \mathcal{H}_N = \underbrace{\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_1}_{N\text{-szeres tenzorszorzat}}. \quad (5.37)$$

Definiáljuk két részecske felcserélésének operátorát,

$$P(i, j) \psi_N(\dots, i, \dots, j, \dots) = \psi_N(\dots, j, \dots, i, \dots), \quad (5.38)$$

melyre idempotens, $P(i, j)^2 = I$, ezért sajátértékei ± 1 .

5.1 Posztulátum (Azonosság elve) *Megkülönböztethetetlen részecskék hullámfüggvényére megköveteljük, hogy a megfigyelhető mennyiségek invariánsak legyenek két részecske felcserélésére. Ebből következik, hogy $\forall \phi_N \in \mathcal{H}_N$ esetén*

$$\langle \phi_N | \psi_N \rangle \langle \psi_N | \phi_N \rangle = \langle \phi_N | P(i, j) \psi_N \rangle \langle P(i, j) \psi_N | \phi_N \rangle, \quad (5.39)$$

tehát

$$P(i, j) |\psi_N\rangle \langle \psi_N| = |\psi_N\rangle \langle \psi_N| P(i, j), \quad (5.40)$$

azaz a $|\psi_N\rangle \langle \psi_N|$ projektor és $P(i, j)$ felcserélhető. Ez akkor és csak akkor lehetséges, ha a ψ_N N -részecske függvény $P(i, j)$ sajátfüggvénye. Aszerint, hogy a sajátérték 1 vagy -1 , a részecskéket rendre bozonoknak vagy fermionoknak hívjuk. Megjegyezzük, hogy ez a tulajdonság a részecskék spinjével a következő kapcsolatban áll:

$$P(i, j) \psi_N = \begin{cases} \psi_N & s = 0, 1, \dots & \text{bozon} \\ -\psi_N & s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots & \text{fermion} \end{cases}. \quad (5.41)$$

Ezen állítást a kvantummechanikában posztuláljuk, kvantumtérelméleti módszerekkel azonban megkapható, mint eredmény.

5.2 Posztulátum (Pauli elv) *Az elektronok fermionok, azaz egy többelektronos hullámfüggvény antiszimmetrikus két elektron felcserélésére nézve.*

5.3 Posztulátum *Azonos részecskékből álló rendszer H_N Hamilton-operátora invariáns két részecske felcserélésére nézve, azaz*

$$P(i, j) H_N - H_N P(i, j) = 0 . \quad (5.42)$$

5.2. Következmény *A hullámfüggvény felcserélési szimmetriája mozgásállandó.*

Bizonyítás. Ha $P(i, j) \psi_N(0) = p \psi_N(0)$, akkor a hullámfüggvény időfejlődéséből,

$$\psi_N(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_N t\right) \psi_N(0) , \quad (5.43)$$

□

tehát

$$\begin{aligned} P(i, j) \psi_N(t) &= P(i, j) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_N t\right) \psi_N(0) \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_N t\right) P(i, j) \psi_N(0) = p \psi_N(t) . \end{aligned}$$

N fermion antiszimmetrikus hullámfüggvényeinek előállítására: ha $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N \in L^2 \otimes \mathbb{C}^{2s+1}(\mathbb{R}^3)$ ortonormált függvények és $P(1, \dots, N)$ az $(1, \dots, N)$ pozitív egészek egy permutációját jelöli, melynek paritása P , akkor a

$$\Psi^A(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P(1, \dots, N)} (-1)^P P(1, \dots, N) \varphi_1(1) \dots \varphi_N(N) \quad (5.44)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(1) & \varphi_2(1) & \dots & \varphi_N(1) \\ \varphi_1(2) & \varphi_2(2) & \dots & \varphi_N(2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1(N) & \varphi_2(N) & \dots & \varphi_N(N) \end{vmatrix} \quad (5.45)$$

Slater-determináns antiszimmetrikus két részecske (két sor) felcserélésére nézve. Az nyilvánvalóan fennáll, hogy ha a Slater determinánst alkotó egyrészecske hullámfüggvények közül legalább kettő megegyezik, akkor a hullámfüggvény azonosan zérus. Ennek közismert megfogalmazása a *Pauli-féle kizárási elv*, miszerint is két fermion nem lehet ugyanabban az egyrészecske állapotban. Egy általános N -fermion hullámfüggvény feírható Slater-determinánsok lineár kombinációjaként,

$$\psi^F(1, \dots, N) = \sum_{\substack{i_1, i_2, \dots, i_N \in \mathbb{N} \\ (i_i \neq i_k)}} C(i_1, i_2, \dots, i_N) \Psi_{i_1, i_2, \dots, i_N}^A(1, \dots, N) , \quad (5.46)$$

ahol az (i_1, i_2, \dots, i_N) indexek a Slater-determinánst alkotó egyrészecske bázisfüggvényeket jelölik.

5.3. Megjegyzés *Mivel a determináns épp az N -edik antiszimmetrikus tenzorszorzat, az N -részecske hullámfüggvényt írhatjuk a következő alakban is:*

$$\Psi^A(1, \dots, N) = \varphi_1(1) \wedge \dots \wedge \varphi_N(N) . \quad (5.47)$$

Bozonrendszerek szimmetrikus hullámfüggvényét hasonló módon állíthatjuk elő

$$\psi^B(1, \dots, N) = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N \in \mathbb{N}} C(i_1, i_2, \dots, i_N) \Psi_{i_1, i_2, \dots, i_N}^S(1, \dots, N), \quad (5.48)$$

ahol

$$\Psi^S(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P(1, \dots, N)} P(1, \dots, N) \varphi_1(1) \dots \varphi_N(N). \quad (5.49)$$

5.4. Megjegyzés A szimmetrikus hullámfüggvény definíciója épp az N -edik szimmetrikus tenzorszorzat:

$$\Psi^S(1, \dots, N) = \varphi_1(1) \vee \dots \vee \varphi_N(N). \quad (5.50)$$

A fermion- ill. bozonrendszerek $\Psi_{i_1, i_2, \dots, i_N}^{A/S}$ hullámfüggvényeit egységesen jellemezhetjük úgy, hogy minden egyrészecske hullámfüggvényre megadjuk, hogy az hányszor fordul elő a többrészecske hullámfüggvény előállításában,

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \begin{cases} n_i \in \{0, 1\} & \text{fermion} \\ n_i \in \mathbb{N}_0 & \text{bozon} \end{cases}. \quad (5.51)$$

Ezt a jelölést nevezzük *betöltési szám reprezentációnak*. Vegyük észre, hogy a fenti hullámfüggvények tetszőleges részecskeszámú rendszer (Fock-tér) bázisát alkotják.

5.1.4. Többelektros rendszerek: Hartree módszer

Próbáljuk meg figyelembe venni egy Z rendszámú atomban az elektronok közötti Coulomb kölcsönhatást. Az elektronrendszer Hamilton operátora,

$$H(1, \dots, N) = \sum_{i=1}^N H_0(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^N V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j), \quad (5.52)$$

ahol

$$H_0(\mathbf{r}_i) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - \frac{kZe^2}{r_i}, \quad (5.53)$$

az egyrészecske Hamilton operátor és

$$V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{ke^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (5.54)$$

a kétrészecske kölcsönhatás. A *Hartree-módszerben* az elektronrendszer közelítő hullámfüggvényét a

$$\psi(1, 2, \dots, N) = \bigotimes_{i=1}^N \varphi_i(\mathbf{r}_i) \chi_{\frac{1}{2}, m_s^i} \quad (5.55)$$

alakban vesszük fel ($\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$), illetve $\chi_{\frac{1}{2}, m_s^i}$ -vel a $|\frac{1}{2}, m_s^i\rangle$ z irányú spin sajátállapotot jelöljük. A rendszer alapállapotának (közelítő) meghatározása céljából az $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$

funkcionált kell minimalizálni a φ_i hullámfüggvények alkalmas megválasztásával. Az egyrészecske hullámfüggvények ortonormáltságát kényszerfeltételként kezelve, bevezetjük a következő funkcionált,

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

ahol az ε_{ij} Lagrange paraméterekre megköveteljük, hogy $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}^*$, mert ez biztosítja hogy az $F(\{\varphi\})$ funkcionál valós értékű legyen. Az ε_{ki} mátrixot diagonalizálva, a sajátértékeket ε_i -val jelölve, mindig áttérhetünk az ortogonális $\{\varphi_i\}$ sajátbázisra, tehát az $F(\{\varphi\})$ funkcionált felvehetjük az

$$F(\{\varphi\}) = \langle \psi | H | \psi \rangle - \sum_i \varepsilon_i \langle \varphi_i | \varphi_i \rangle \quad (5.56)$$

$$= \sum_i \int d^3r \varphi_i^*(\mathbf{r}) H_0(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int \int d^3r' d^3r \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_j^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_i(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}') \quad (5.57)$$

$$- \sum_i \varepsilon_i \int d^3r \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r})$$

alakban. Meg kell vizsgálnunk, hogyan változik a funkcionál egy bázisfüggvény (infinitezimális) változtatása esetén, $\varphi_k + \delta\varphi_k$. A Hamilton operátor hermitikusságából következik, hogy a $\varphi_k^* + \delta\varphi_k^*$ variálás is ugyanarra az eredményre vezet, így kövessük ezt az eljárást:

$$\begin{aligned} \delta_{\varphi_k^*} F(\{\varphi\}) &= \int d^3r \delta\varphi_k^*(\mathbf{r}) H_0(\mathbf{r}) \varphi_k(\mathbf{r}) - \varepsilon_k \int d^3r \delta\varphi_k^*(\mathbf{r}) \varphi_k(\mathbf{r}) \quad (5.58) \\ &+ \sum_{i(\neq k)} \int \int d^3r d^3r' \delta\varphi_k^*(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}')^* V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_i(\mathbf{r}') \varphi_k(\mathbf{r}) , \end{aligned}$$

ahol kihasználtuk, hogy $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V(\mathbf{r}', \mathbf{r})$. A minimum (szélsőérték) feltétele, hogy teszőleges $\delta\varphi_k^*(\mathbf{r})$ variációra a fenti kifejezés zérussal egyezzen meg, amiből következnek a *Hartree-egyenletek*,

$$(H_0(\mathbf{r}) + V_k^H(\mathbf{r})) \varphi_k(\mathbf{r}) = \varepsilon_k \varphi_k(\mathbf{r}) \quad (k = 1, 2, \dots, N) . \quad (5.59)$$

Itt bevezettük az ún. Hartree-potenciális energiát,

$$V_k^H(\mathbf{r}) = \sum_{i(\neq k)} \int d^3r' \varphi_i^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_i(\mathbf{r}') = k e^2 \int d^3r' \frac{\varrho^{(k)}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} , \quad (5.60)$$

ahol

$$\varrho^{(k)}(\mathbf{r}) = \sum_{i(\neq k)} |\varphi_i(\mathbf{r})|^2 . \quad (5.61)$$

Az (5.59) egyenlet formailag hasonló egy stacionárius Schrödinger-egyenlethez, csupán a $V_k^H(\mathbf{r})$ potenciál a φ_i függvények funkcionálja és ráadásul függ az egyrészecske állapot indexétől (k). (Ez utóbbi kellemetlen tulajdonságot az ún. Hartree-Fock módszer orvoslja.) Az (5.59) Hartree-egyenleteket az (5.60) és (5.61) összefüggések felhasználásával önkonzisztens módon, iterálva lehet megoldani.

A Hartree egyenleteket $\varphi_k^*(\mathbf{r})$ -rel beszorozva, majd kiintegrálva, az ε_k Lagrange paraméterek kifejezhetők,

$$\varepsilon_k = \int d^3r \varphi_k^*(\mathbf{r}) H_0(\mathbf{r}) \varphi_k(\mathbf{r}) + \int d^3r \varrho_k(\mathbf{r}) V_k^H(\mathbf{r}) , \quad (5.62)$$

ahol $\varrho_k(\mathbf{r}) = |\varphi_k(\mathbf{r})|^2$. Vegyük észre, hogy az elektronrendszer elektrosztatikus energiájára (Hartree energia) fennáll a következő összefüggés,

$$E_H = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int \int d^3r' d^3r \frac{\varrho_i(\mathbf{r}) \varrho_j(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \int d^3r \varrho_k(\mathbf{r}) V_k^H(\mathbf{r}) , \quad (5.63)$$

ezért az elektronrendszer energiája,

$$E = \langle \psi | H \psi \rangle = \sum_{k=1}^N \varepsilon_k - E_H . \quad (5.64)$$

A kölcsönható elektronrendszer energiáját Hartree közelítésben tehát megkapjuk, ha az effektív egyrészecske energiáknak tekinthető Lagrange multiplikátorok összegéből levonjuk a kölcsönhatási energia önkonzisztens megoldásokkal vett értékét (*double-counting* járulék). Ez az eredmény nagyfokú hasonlóságot mutat pl. a Heisenberg spin-modell átlagtér közelítésében kapott energia kifejezéséhez, így a Hartree-módszert szokás nevezni a kölcsönható elektronrendszer átlagtér közelítésének.

5.2. Feladatok

5.2.1. Példák

5.1. Feladat *Lássuk be, hogy a $p_r = \frac{\hbar}{i} \left(\partial_r + \frac{1}{r} \right)$ operátor hermitikus!*

5.2. Feladat *Bizonyítsuk be, hogy*

$$p_r = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \partial_r r \quad (5.65)$$

$$p_r^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{r} \partial_r^2 r \right) \quad (5.66)$$

$$= -\hbar^2 \left[\frac{1}{r} \partial_r r \partial_r + \frac{1}{r} \partial_r \right] \quad (5.67)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{r^2} [r \partial_r r \partial_r + r \partial_r] \quad (5.68)$$

$$= -\hbar^2 \left[\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r \right] . \quad (5.69)$$

5.3. Feladat *Mutassuk meg, hogy*

$$[L_i, x_k] = i\hbar \varepsilon_{ikl} x_l , \quad (5.70)$$

$$[L_i, p_k] = i\hbar \varepsilon_{ikl} p_l , \quad (5.71)$$

következésképpen

$$[L_i, r^2] = 0 , \quad [L_i, \frac{1}{r^2}] = 0 , \quad [L_i, p^2] = 0 ! \quad (5.72)$$

Segítség: *Használjuk a (4.87) egyenlet eredményét!*

5.4. Feladat *Bizonyítsa ba a következő csererelációkat:*

$$[p_r, r] = \frac{\hbar}{i} , \quad (5.73)$$

$$[p_r, r^n] = \frac{\hbar}{i} n r^{n-1} , \quad (5.74)$$

$$[p_r, F(r)] = \frac{\hbar}{i} \frac{dF(r)}{dr} ! \quad (5.75)$$

5.5. Feladat *A Kepler-probléma Hamilton-operátora*

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{\alpha}{r} .$$

Az ismert felcserélési relációk segítségével lássa be, hogy

$$\dot{r} = \frac{p_r}{m} \quad \text{és} \quad \dot{p}_r = \frac{L^2}{mr^3} - \frac{\alpha}{r^2} ,$$

ahol $\dot{A} = \frac{i}{\hbar} [H, A]$ a (3.52) képletben szereplő kvantummechanikai időderivált!

5.6. Feladat Határozzuk meg egy R sugarú $2D$ potenciál dobozba zárt részecske sajátállapotait és első néhány sajátenergiáját.

5.7. Feladat Határozzuk meg egy R sugarú gömbbe zárt részecske sajátállapotait és első néhány sajátenergiáját! Mekkora nyomást fejt ki a részecske a gömb falára?

5.8. Feladat Határozzuk meg az R sugarú gömbbe zárt elektron alapállapotában az $\langle r^2 \rangle$ értékét!

5.9. Feladat Ismeretes, hogy a H Hamiltonoperátor bármely Ψ sajátüggvényére

$$\langle \Psi | [H, A] | \Psi \rangle = 0 \quad ,$$

ahol A tetszőleges lineáris operátor. Az $A = \mathbf{r} \mathbf{p}$ választással bizonyítsuk be a kvantummechanikai viriáltételt

$$2 \left\langle \Psi \left| \frac{p^2}{2m} \right| \Psi \right\rangle - \langle \Psi | \mathbf{r} \nabla V(\mathbf{r}) | \Psi \rangle = 0 \quad ,$$

ahol $H = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r})$. Mit kapunk $V(\mathbf{r}) = Ar^s$ alakú potenciál esetén?

5.10. Feladat Kommutációs relációk segítségével vezessük le, hogy a hidrogénatom $|n\ell m\rangle$ sajátállapotában

$$\left\langle n\ell m \left| \frac{1}{r} \right| n\ell m \right\rangle = \frac{1}{a_0 n^2} \quad , \quad (5.76)$$

következésképpen

$$\langle n\ell m | V | n\ell m \rangle = 2E_n \quad \text{és} \quad \langle n\ell m | T | n\ell m \rangle = -E_n \quad , \quad (5.77)$$

valamint, hogy

$$\langle n\ell m | r | n\ell m \rangle = \frac{a_0}{2} [3n^2 - \ell(\ell + 1)] \quad , \quad (5.78)$$

ahol $a_0 = \frac{\hbar^2}{m\alpha}$ a Bohr-sugár, $E_n = -\frac{\alpha}{2a_0 n^2} = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2 n^2}$ és a potenciált $V(r) = -\frac{\alpha}{r}$ alakban írtuk!

Segítség: Vizsgáljuk a $[H, rp_r]$ és a $[H, r^2 p_r]$ kommutátorokat!

5.11. Feladat Mivel a hidrogénatom $\psi_{n\ell m}$ sajátállapotában a baloldali kommutátor várható értéke nyilvánvalóan zérus, felírhatjuk, hogy

$$\langle r^{-2} \rangle_{n\ell m} = \ell(\ell + 1)a \langle r^{-3} \rangle_{n\ell m} \quad , \quad (5.79)$$

ahol $a = \hbar^2/m\alpha$ és $\langle r^s \rangle_{n\ell m}$ az r^s operátor várható értéke a $\psi_{n\ell m}$ sajátállapotban.

Hasonló gondolatmenet alapján, a $[H, r^{s+1} p_r]$ kommutátor célszerű átalakításával vezessük le az ún. Kramers-összefüggést:

$$\frac{s+1}{n^2} \langle r^s \rangle_{n\ell m} - (2s+1)a \langle r^{s-1} \rangle_{n\ell m} + \frac{s}{4} [(2\ell+1)^2 - s^2] a^2 \langle r^{s-2} \rangle_{n\ell m} = 0 \quad ! \quad (5.80)$$

A fenti összefüggés természetesen csak $s > -2\ell - 3$ esetben értelmezhető.

Segítség: A levezetés közben alkalmazzuk, hogy

$$[p_r, r^s] = \frac{\hbar}{i} s r^{s-1} \quad (5.81)$$

valamit bizonyítsuk, hogy

$$[H, r^{s+1}] = -\frac{\hbar^2 s(s+1)}{2m} r^{s-1} + \frac{\hbar(s+1)}{im} r^s p_r, \quad (5.82)$$

ill. a végén használjuk ki az $E_{nlm} = -\alpha/(2an^2)$ összefüggést.

5.12. Feladat Mutassa meg, hogy két kölcsönható részecske Hamilton operátora,

$$H(1, 2) = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2),$$

fölírható mint

$$H(1, 2) = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r}),$$

ahol

$$M = m_1 + m_2, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$

valamint

$$\mathbf{P} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}, \quad \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}.$$

5.13. Feladat A C_{60} molekula egy focilabda alakú, 60 db szénatomból álló kalitka, amelybe különböző atomokat zárhatunk be. A belsejébe helyezett nitrogén atom vegyérték elektronjainak a spinje $S_1 = 3/2$, az egyszeresen ionizált C_{60}^{-1} spinje $S_2 = 1/2$. A két rendszer H_1 és H_2 Hamilton operátora felcserélhető az \mathbf{S}_1 és \mathbf{S}_2 spinoperátorokkal, melyek természetesen egymással is felcserélhetőek. A közös rendszer alapállapota 8-szorosan degenerált, ha elhanyagoljuk a közöttük lévő kölcsönhatást ($H_{12} = H_1 + H_2$).

Hogyan hasad fel az alapállapot energiája, ha figyelembe vesszük a két rendszer közötti $H_{12} = JS_1 S_2$ alakú kölcsönhatást?

Segítség: Mutassa meg és használja föl, hogy $[H_{12}, \mathbf{S}] = 0$ és $[H_{12}, \mathbf{S}^2] = 0$!

5.14. Feladat Legyen adva a következő két, (ún. Bell) kétrészecske spin állapot:

$$\psi^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_{1/2}^{1/2}(1) \chi_{1/2}^{1/2}(2) \pm \chi_{1/2}^{-1/2}(1) \chi_{1/2}^{-1/2}(2) \right) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \uparrow\rangle_2 \pm |\downarrow, \downarrow\rangle_2) \quad (5.83)$$

a) Bizonyítsa be, hogy a fenti állapotok ortonormáltak!

b) A fenti állapotok sajátállapotai-e az $S = S_1^z + S_2^z$ kétrészecske spinoperátornak?

c) Mennyi a fenti állapotban levő kétrészecske rendszer spinjének z -irányú (átlag)értéke?

$$\langle \psi^\pm | S_z | \psi^\pm \rangle$$

d) Mennyi a fenti állapotban levő kétrészecske rendszer spinnégyzetének átlagértéke?

$$\langle \psi^\pm | \mathbf{S}^2 | \psi^\pm \rangle$$

5.15. Feladat Az ú.n. Moshinsky-atom esetében két egyforma részecske mozog egy dimenziós harmonikus potenciálban úgy, hogy egymással is harmonikus potenciállal hatnak kölcsön:

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2 (x_1^2 + x_2^2) + \frac{1}{2}m\omega^2 (x_1 - x_2)^2 .$$

Mutassuk meg, hogy az összeg és különbség koordináták bevezetésével a Hamilton operátor szeparálható két független operátor összegére. Adjuk meg a sajátállapotokat! Tételezzük fel, hogy a részecskék $S = 1/2$ spinű fermionok. Adjuk meg a szingulet (spin rész anti-szimmetrikus) és triplet (spin rész szimmetrikus) állapotokat!

5.16. Feladat A Moshinsky atom esetében két harmonikus potenciálban mozgó részecske harmonikus potenciállal hat kölcsön egymással. A probléma Hamilton operátorát a következőképpen adhatjuk meg:

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2(r_1^2 + r_2^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(r_1 - r_2)^2 \quad (5.84)$$

Határozzuk meg a Hartree-Fock alapállapot energiát!

5.2.2. Megoldások

5.1 Megoldás Az operátor hermitikusságának elegendő feltétele:

$$\langle g | p_r f \rangle = \langle p_r g | f \rangle .$$

Fejtsük ki a skalárszorzatokat:

$$\begin{aligned} \langle g | p_r f \rangle &= \int_0^\infty r^2 g^*(r) \frac{\hbar}{i} \left(\partial_r + \frac{1}{r} \right) f(r) dr = \frac{\hbar}{i} \int_0^\infty r^2 g^*(r) \partial_r f(r) dr + \frac{\hbar}{i} \int_0^\infty r g^*(r) f(r) dr \\ &= \frac{\hbar}{i} r^2 g^*(r) f(r) \Big|_0^\infty + \left(\frac{\hbar}{i} \right)^* \int_0^\infty \partial_r (r^2 g^*(r)) f(r) dr + \frac{\hbar}{i} \int_0^\infty r g^*(r) f(r) dr \\ &= \left(\frac{\hbar}{i} \right)^* \int_0^\infty r^2 \partial_r (g^*(r)) f(r) dr + \left(\frac{\hbar}{i} \right)^* \int_0^\infty r g^*(r) f(r) dr \\ &= \int_0^\infty \left(\frac{\hbar}{i} \left(\partial_r + \frac{1}{r} \right) \right)^* f(r) dr = \langle p_r g | f \rangle . \end{aligned}$$

5.2 Megoldás 1.

$$\frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \partial_r r f(r) = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{1}{r} f(r) + \partial_r f(r) \right) = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{1}{r} + \partial_r \right) f(r)$$

2.

$$p_r^2 = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \partial_r r \right)^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{r} \partial_r r \right) \left(\frac{1}{r} \partial_r r \right) = -\hbar^2 \frac{1}{r} \partial_r^2 r$$

3.

$$-\hbar^2 \frac{1}{r} \partial_r^2 r = -\hbar^2 \frac{1}{r} \partial_r (\partial_r r) = -\hbar^2 \frac{1}{r} \partial_r (1 + r \partial_r) = -\hbar^2 \left(\frac{1}{r} \partial_r + \frac{1}{r} \partial_r r \partial_r \right)$$

4.

$$-\hbar^2 \left(\frac{1}{r} \partial_r + \frac{1}{r} \partial_r r \partial_r \right) = -\hbar^2 \frac{1}{r^2} (r \partial_r + r \partial_r r \partial_r)$$

5.

$$-\hbar^2 \frac{1}{r^2} (r \partial_r + r \partial_r r \partial_r) = -\hbar^2 \frac{1}{r^2} (r \partial_r + r \partial_r + r^2 \partial_r^2) = -\hbar^2 \left(\frac{2}{r} \partial_r + \partial_r^2 \right)$$

5.3 Megoldás Írjuk fel a kommutátorokat és használjuk fel L definícióját:

$$[L_i, x_k] = \varepsilon_{ijl} [x_l p_j, x_k] = \varepsilon_{ijl} x_l [p_j, x_k] = \frac{\hbar}{i} \varepsilon_{ijl} \delta_{jk} x_l = i\hbar \varepsilon_{ikl} x_l .$$

Hasonlóan,

$$[L_i, p_k] = \varepsilon_{ijl} [x_j p_l, p_k] = \varepsilon_{ijl} [x_j, p_k] p_l = i\hbar \varepsilon_{ijl} \delta_{jk} p_l = i\hbar \varepsilon_{ikl} p_l .$$

A (4.87) egyenletben bizonyított

$$[L_i, f(\mathbf{r})] = \frac{\hbar}{i} (\mathbf{r} \times \nabla f(\mathbf{r}))_i$$

azonosságnak megfelelően:

$$[\mathbf{L}, r^2] = \frac{\hbar}{i} \mathbf{r} \times 2\mathbf{r} = 0, \quad [\mathbf{L}, \frac{1}{r^2}] = \frac{\hbar}{i} \mathbf{r} \times 2 \frac{\mathbf{r}}{r^4} = 0 .$$

$$[L_i, p^2] = \varepsilon_{ijk} [x_j p_k, p_l p_l] = \varepsilon_{ijk} ([x_j, p_l] p_k p_l + p_l [x_j, p_l] p_k) = 2i\hbar \varepsilon_{ijk} \delta_{jl} p_k p_l = 0$$

5.4 Megoldás Az első felcserélési reláció meghatározásához hatassuk a kommutátort Hilbert tér egy $f(r)$ elemére:

$$\begin{aligned} [p_r, r] f(r) &= \frac{\hbar}{i} \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}, r \right] f(r) = \frac{\hbar}{i} \left[\frac{\partial}{\partial r}, r \right] f(r) = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} r f(r) - r \frac{\partial}{\partial r} f(r) \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(f(r) + r \frac{\partial}{\partial r} f(r) - r \frac{\partial}{\partial r} f(r) \right) = \frac{\hbar}{i} f(r), \end{aligned}$$

tehát a kommutátor:

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

A következő kommutátort hasonlóan határozhatjuk meg:

$$[p_r, F(r)] = \frac{\hbar}{i} \left[\frac{\partial}{\partial r}, F(r) \right] = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} F(r) - F(r) \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad (5.85)$$

$$= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial F(r)}{\partial r} + F(r) \frac{\partial}{\partial r} - F(r) \frac{\partial}{\partial r} \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial F(r)}{\partial r} . \quad (5.86)$$

Az összefüggést alkalmazva az r^n függvényre a hátralévő felcserélési relációt is igazolhatjuk.

5.5 Megoldás A kvantummechanikai idő derivált definícióját felhasználva:

$$\dot{r} = \frac{i}{\hbar}[H, r] = \frac{i}{\hbar} \left(\left[\frac{p_r^2}{2m}, r \right] + \left[\frac{L^2}{2mr^2}, r \right] - \left[\frac{\alpha}{r}, r \right] \right)$$

Az L^2 operátor felcserélhető az r operátorral, így csak az első tag marad meg:

$$\dot{r} = \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} ([p_r, r]p_r + r[p_r, r]) = \frac{p_r}{m} .$$

A radiális impulzus időderiváltját hasonlóan határozhatjuk meg:

$$\dot{p}_r = \frac{i}{\hbar}[H, p_r] = \frac{i}{\hbar} \left(\left[\frac{L^2}{2mr^2}, p_r \right] - \left[\frac{\alpha}{r}, p_r \right] \right)$$

Az (5.85) egyenlet

$$[p_r, F(r)] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial F}{\partial r} \quad (5.87)$$

összefüggését felhasználva az előző egyenletet a következőképpen írhatjuk fel:

$$\dot{p}_r = \frac{L^2}{mr^3} - \frac{\alpha}{r^2}$$

5.6 Megoldás A rendszernek henger szimmetriája van ezért a probléma Hamilton operátora felcserélhető az impulzusmomentum operátor L_z komponensével. Nyilvánvalóan közös sajátállapotuk lesz, tehát a megoldást kereshetjük

$$\psi(r, \varphi) = e^{i\mu\varphi} \phi(r)$$

alakban. A szabad részecske Hamilton operátora henger koordinátákban a következő lesz:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

Helyettesítsük be a hullámfüggvényt és írjuk fel a radiális Schrödinger-egyenletet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) - \frac{\mu^2}{r^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} - \frac{\mu^2}{r^2} \phi \right) = E\phi$$

Alakítsuk tovább a Schrödinger-egyenletet:

$$r^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + r \frac{\partial \phi}{\partial r} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} r^2 - \mu^2 \right) \phi = 0$$

Vezessük be a

$$q = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} r \quad (5.88)$$

változót és használjuk fel az előző egyenletben:

$$q^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial q^2} + q \frac{\partial \phi}{\partial q} + (q^2 - \mu^2) \phi = 0 .$$

Az előző differenciálegyenletben felismerhetjük a Bessel-féle differenciálegyenletet, amelynek –minő meglepetés – a Bessel függvények a megoldásai:

$$\psi(r, \varphi) = e^{i\mu\varphi} J_\mu \left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} r \right)$$

Természetesen a körön kívül a hullámfüggvénynek el kell tűnnie, hiszen itt végtelen nagy a potenciál. Az R -nél érvényes peremfeltétel:

$$J_\mu \left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} R \right) = 0 .$$

Az előző feltételből meghatározhatjuk a sajátállapotok energiáit:

$$E_{i\mu} = \frac{\hbar^2 x_{i\mu}^2}{2mR^2} ,$$

ahol $x_{i\mu}$ a J_μ Bessel függvény i -ik zérushelye.

5.7 Megoldás A rendszer gömbszimmetriájából következően a megoldást egy radiális hullámfüggvény és a gömbfüggvények szorzatában kereshetjük:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \phi(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi) .$$

A szabad részecske Hamilton-operátora gömbi koordinátákban a következő lesz:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{2mr^2}$$

Helyettesítsük be a szorzat hullámfüggvényt és írjuk fel az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \phi \right) = E \phi$$

Rendezzük át az előző egyenletet,

$$r^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial \phi}{\partial r} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} r^2 - l(l+1) \right) \phi = 0$$

Vezessük be a

$$q = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} r \tag{5.89}$$

változót és helyettesítsük be a Schrödinger-egyenletbe:

$$q^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial q^2} + 2q \frac{\partial \phi}{\partial q} + (q^2 - l(l+1)) \phi = 0 .$$

A fenti egyenletben ráismerhetünk a gömbi Bessel-függvény differenciálegyenletére. A sajátállapot tehát a

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = j_l \left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} r \right) Y_l^m(\vartheta, \varphi) \tag{5.90}$$

alakba írható fel. A hullámfüggvénynek zérusnak kell lennie a gömbön kívül, és el kell tűnnie a gömb határán:

$$j_l \left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} R \right) = 0 ,$$

amely feltételből következik, hogy az energia sajátértékek a következőképpen állíthatók elő:

$$E_{il} = \frac{\hbar^2 x_{il}^2}{2mR^2} ,$$

ahol x_{il} a j_l szférikus Bessel-függvény zérushelyei. Tételezzük fel, hogy a részecske P nyomást fejt ki a gömb falára. Ha ΔR -rel csökkentjük a gömb térfogatát, a rendszer energiája $\Delta E = P \Delta R 4\pi R^2$ értékkel növekszik, vagyis

$$P = -\frac{1}{4\pi R^2} \frac{\partial E}{\partial R} = \frac{\hbar^2 x_{il}^2}{4\pi m R^5} .$$

5.8 Megoldás Az (5.90) egyenlet szerint a gömbbe zárt részecske alapállapotú hullámfüggvénye:

$$\psi_0 = \mathcal{N} j_0 \left(\pi \frac{r}{R} \right) = \mathcal{N} \frac{\sin \left(\frac{\pi}{R} r \right)}{\frac{\pi}{R} r} ,$$

ahol \mathcal{N} a normálási tényező. Meghatározásához számítsuk ki a hullámfüggvény négyzetének integrálját a gömbön belül:

$$\mathcal{N}^{-2} = \int_0^R \frac{\sin^2 \left(\frac{\pi}{R} r \right)}{\left(\frac{\pi}{R} r \right)^2} r^2 dr = \left(\frac{R}{\pi} \right)^3 \int_0^\pi \sin^2(x) dx = \frac{R^3}{2\pi^2} .$$

A várható érték a következő lesz:

$$\langle r^2 \rangle = \frac{2\pi^2}{R^3} \int_0^R \frac{\sin^2 \left(\frac{\pi}{R} r \right)}{\left(\frac{\pi}{R} r \right)^2} r^4 dr = \frac{2R^2}{\pi^3} \int_0^\pi x^2 \sin^2(x) dx = R^2 \left(\frac{1}{3} + \frac{1}{2\pi^2} \right) .$$

5.9 Megoldás Először határozzuk meg a $[H, \mathbf{r}p]$ kommutátort, ahol

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) : \tag{5.91}$$

$$[H, r_i p_i] = [H, r_i] p_i + r_i [H, p_i] .$$

$$[H, r_i] = \frac{1}{2m} [p_j p_j, r_i] = \frac{1}{2m} (p_j [p_j, r_i] + [p_j, r_i] p_j) = \frac{\hbar}{im} \delta_{ij} p_j = \frac{\hbar}{i} \frac{p_i}{m}$$

$$[H, p_i] = [V(\mathbf{r}), p_i] = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial r_i}$$

Helyettesítsük be az előző kommutátorokat a $[H, \mathbf{r}p]$ felcserélési relációba:

$$[H, r_i p_i] = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{p^2}{m} - \mathbf{r}V(\mathbf{r}) \right)$$

Miután egy tetszőleges operátor a Hamilton operátorral vett kommutátorának a stacionárius állapotokra vett várható értéke eltűnik, igazoltuk az bizonyítandó állítást:

$$2 \left\langle \psi \left| \frac{p^2}{2m} \right| \psi \right\rangle = \langle \psi | \mathbf{r} \nabla V | \psi \rangle .$$

$V(r) = Ar^s$ potenciál esetén $\mathbf{r}\nabla V = sAr^s$, tehát

$$2\langle\psi|T|\psi\rangle = s\langle\psi|V|\psi\rangle,$$

ahol T a kinetikus energia operátora. Harmonikus oszcillátor esetén $s = 2$, így a kinetikus energia várható értéke megegyezik a potenciális energia várható értékével, vagyis eredményünk összhangban a 2.22. feladat eredményével.

5.10 Megoldás Az (5.5.) számú feladat megoldásából tudjuk, hogy:

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

$$[H, p_r] = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{L^2}{mr^3} - \frac{\alpha}{r^2} \right)$$

Határozzuk meg a $[H, rp_r]$ felcserélési relációt, amelynek a H sajátállapotain vett várható értéke eltűnik:

$$[H, rp_r] = [H, r]p_r + r[H, p_r] = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{p_r^2}{m} + \frac{L^2}{mr^2} - \frac{\alpha}{r} \right) = \frac{\hbar}{i} \left(2H + \frac{\alpha}{r} \right)$$

$$\langle n\ell m | [H, rp_r] | n\ell m \rangle = \frac{\hbar}{i} \left(\langle n\ell m | 2H | n\ell m \rangle + \left\langle n\ell m \left| \frac{\alpha}{r} \right| n\ell m \right\rangle \right) = 0$$

Tehát

$$-2E_n = 2\frac{\alpha}{2n^2a_0} = \left\langle n \left| \frac{\alpha}{r} \right| n \right\rangle$$

$$\left\langle n \left| \frac{1}{r} \right| n \right\rangle = \frac{1}{n^2a_0}.$$

Az $\langle n\ell m | r | n\ell m \rangle$ várható érték meghatározásához induljunk ki a $[H, r^2p_r]$ felcserélési relációból:

$$[H, r^2p_r] = [H, r^2]p_r + r^2[H, p_r] = (r[H, r] + [H, r]r)p_r + r^2[H, p_r].$$

Számítsuk ki az előző egyenletben fellépő kommutátorokat:

$$r[H, r] + [H, r]r = \frac{\hbar}{i}(rp_r + p_rr) = \frac{\hbar}{i} \left(2rp_r + \frac{\hbar}{i} \right)$$

és helyettesítsük be:

$$[H, r^2p] = \frac{\hbar}{i} \left(r^4 \frac{p_r^2}{2m} + 2r \frac{L^2}{2mr^2} - r \frac{\alpha}{r} + \frac{\hbar}{i} p_r \right) = \frac{\hbar}{i} \left(4rH - \frac{L^2}{mr} + 3\alpha + \frac{\hbar}{i} p_r \right)$$

A radiális impulzus operátor várható értéke eltűnik, hiszen az operátor előállítható a Hamilton-operátor és r kommutátoraként. Természetesen az egész $[H, r^2p]$ felcserélési reláció várható értéke eltűnik:

$$4\langle n\ell m | r | n\ell m \rangle E_n - \frac{\ell(\ell+1)}{m} \left\langle n\ell m \left| \frac{1}{r} \right| n\ell m \right\rangle + 3\alpha = 0$$

$$2\frac{\alpha}{n^2a_0} \langle n\ell m | r | n\ell m \rangle - \frac{\hbar^2}{m\alpha} \frac{\alpha\ell(\ell+1)}{n^2a_0} + 3\alpha = 0$$

$$\frac{2}{n^2a_0} \langle n\ell m | r | n\ell m \rangle - \frac{\ell(\ell+1)}{n^2a_0} + 3 = 0$$

Tehát

$$\langle n\ell m | r | n\ell m \rangle = \frac{a_0}{2} (3n^2 - \ell(\ell+1))$$

5.11 Megoldás Az (5.5.) feladatban a

$$[H, p_r] = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{L^2}{mr^3} - \frac{\alpha}{r^2} \right) \quad (5.92)$$

összefüggést már igazoltuk, használjuk fel ezt a $[H, r^{s+1}p_r]$ felcserélési reláció igazolására:

$$[H, r^{s+1}p_r] = [H, r^{s+1}]p_r + r^{s+1}[H, p_r]$$

$$[H, r^{s+1}] = \frac{1}{2m} [p_r^2, r^{s+1}] = \frac{1}{2m} (p_r [p_r, r^{s+1}] + [p_r, r^{s+1}] p_r) = \frac{\hbar}{i} \frac{s+1}{2m} (r^s p_r + p_r r^s) .$$

Az utolsó lépésben használjuk ki ismét a $[p_r, r^s]$ felcserélési relációját:

$$[H, r^{s+1}p_r] = \frac{\hbar}{i} \frac{s+1}{m} r^s p_r - \frac{\hbar^2}{2m} s(s+1) r^{s-1}$$

A $[H, r^{s+1}p_r]$ kommutátor az előzőeket kihasználva így írható fel:

$$[H, r^{s+1}p_r] = \frac{\hbar}{i} \left((s+1) r^s \frac{p_r^2}{m} + \frac{L^2}{m} r^{s-2} - \alpha r^{s-1} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} s(s+1) r^{s-1} p_r .$$

A kinetikus energia kétszeresét kifejezhetjük a Hamilton operátor segítségével:

$$\frac{p_r^2}{m} = 2H - \frac{L^2}{m} + \frac{2\alpha}{r} .$$

Helyettesítsük be az előző kommutátorba:

$$[H, r^{s+1}p_r] = \frac{\hbar}{i} \left((s+1) r^s 2H - s \frac{L^2}{m} r^{s-2} + (2s+1) \alpha r^{s-1} + \frac{\hbar}{2mi} s(s+1) r^{s-1} p_r \right)$$

Az utolsó tagot kifejezhetjük a $[H, r^s]$ kommutátor segítségével:

$$\frac{\hbar}{2mi} s(s+1) r^{s-1} p_r = \frac{s+1}{2} [H, r^s] + \frac{\hbar^2 s(s^2-1)}{4m} r^{s-2} .$$

Kihasználva, hogy a Hamilton operátor és egy tetszőleges operátor kommutátorának a stacionárius állapotokon vett várható értéke eltűnik, a következő összefüggést kapjuk:

$$\begin{aligned} \langle n\ell m | [H, r^{s+1}p_r] | n\ell m \rangle &= (s+1) \langle r^s \rangle 2E_n - s \frac{\hbar^2}{m} l(l+1) \langle r^{s-2} \rangle + (2s+1) \alpha \langle r^{s-1} \rangle \\ &+ \frac{\hbar^2}{4m} s(s^2-1) \langle r^{s-2} \rangle = 0 \end{aligned}$$

Az előző egyenletet átrendezve a Kramer-összefüggést kapjuk:

$$-\frac{s+1}{n^2 a} \langle r^s \rangle + (2s+1) \langle r^{s-1} \rangle - s \frac{a}{4} ((2\ell+1)^2 - s^2) \langle r^{s-2} \rangle = 0 .$$

5.12 Megoldás Az új változók a következők legyenek:

$$\mathbf{R} = \alpha \mathbf{r}_1 + \beta \mathbf{r}_2$$

$$\mathbf{r} = \gamma \mathbf{r}_1 + \delta \mathbf{r}_2$$

ahol

$$\alpha = \frac{m_1}{m_1 + m_2}, \quad \beta = \frac{m_2}{m_1 + m_2}, \quad \gamma = 1, \quad \delta = -1$$

Írjuk fel az impulzus operátorokat az új változókkal:

$$\mathbf{p}_1 = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) = \alpha \mathbf{P} + \gamma \mathbf{p}$$

$$\mathbf{p}_2 = \beta \mathbf{P} + \delta \mathbf{p}$$

Fejezzük ki a kinetikus energia operátorát az új impulzusokkal:

$$\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} = \frac{1}{2m_1} (\alpha^2 P^2 + \gamma^2 p^2 + 2\alpha\gamma \mathbf{P}\mathbf{p}) + \frac{1}{2m_2} (\beta^2 P^2 + \delta^2 p^2 + 2\beta\delta \mathbf{P}\mathbf{p}) .$$

Az együtthatók fenti választásával, amint arról könnyen meggyőződhetünk,

$$\frac{1}{2m_1} \alpha\gamma \mathbf{P}\mathbf{p} + \frac{1}{2m_2} \beta\delta \mathbf{P}\mathbf{p} = 0 ,$$

így a Hamilton operátort a következő alakba írhatjuk:

$$H = \left(\frac{\alpha^2}{2m_1} + \frac{\beta^2}{2m_2} \right) P^2 + \left(\frac{\gamma^2}{2m_1} + \frac{\delta^2}{2m_2} \right) p^2 + V(\mathbf{r})$$

Helyettesítsük be az α , β , γ , δ együtthatókat:

$$H = \frac{1}{2(m_1 + m_2)} P^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) p^2 + V(\mathbf{r}) .$$

5.13 Megoldás A két rendszer kölcsönhatását leíró Hamilton operátort a következő alakba írjuk át:

$$H_{12} = J \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 = \frac{J}{2} (\mathbf{S}^2 - \mathbf{S}_1^2 - \mathbf{S}_2^2) ,$$

ahol $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$. Az $S_1 = 3/2$ és $S_2 = 1/2$ spinek összeadásából \mathbf{S}^2 egy háromszorosan degenerált $S = 1$ sajátállapotát és \mathbf{S}^2 egy ötszörösén degenerált $S = 2$ sajátállapotát állíthatjuk elő. Ezekben az állapotokban a rendszer energiája a következő lesz:

$$E_S = E_N + E_{C_{60}} + \frac{J}{2} (S(S+1) - S_1(S_1+1) - S_2(S_2+1)) .$$

Tehát $E_1 = E_N + E_{C_{60}} - 5/4J$ és $E_2 = E_N + E_{C_{60}} + 3/4J$, a felhasadás mértéke pedig $E_2 - E_1 = 2J$.

5.14 Megoldás a) Először számítsuk ki a két Bell állapot skalárszorzatait:

$$\langle \psi^\pm | \psi^\pm \rangle = \frac{1}{2} (\langle \uparrow, \uparrow | \pm \langle \downarrow, \downarrow |) (| \uparrow, \uparrow \rangle \pm | \downarrow, \downarrow \rangle) = 1$$

$$\langle \psi^+ | \psi^- \rangle = \frac{1}{2} (\langle \uparrow, \uparrow | + \langle \downarrow, \downarrow |) (| \uparrow, \uparrow \rangle - | \downarrow, \downarrow \rangle) = 0 ,$$

ahol kihasználtuk, hogy

$$\langle \uparrow, \uparrow | \uparrow, \uparrow \rangle = 1, \quad \langle \downarrow, \downarrow | \downarrow, \downarrow \rangle = 1, \quad \langle \uparrow, \uparrow | \downarrow, \downarrow \rangle = 0 .$$

b) Határozzuk meg az $S_1^z + S_2^z$ operátor hatását a Bell állapotokra:

$$(S_1^z + S_2^z) (|\uparrow, \uparrow\rangle \pm |\downarrow, \downarrow\rangle) = S_1^z (|\uparrow, \uparrow\rangle \pm |\downarrow, \downarrow\rangle) + S_2^z (|\uparrow, \uparrow\rangle \pm |\downarrow, \downarrow\rangle)$$

$$S_1^z (|\uparrow, \uparrow\rangle \pm |\downarrow, \downarrow\rangle) = \frac{1}{2} (|\uparrow, \uparrow\rangle \mp |\downarrow, \downarrow\rangle)$$

$$S_2^z (|\uparrow, \uparrow\rangle \pm |\downarrow, \downarrow\rangle) = \frac{1}{2} (|\uparrow, \uparrow\rangle \mp |\downarrow, \downarrow\rangle)$$

Vagyis az $S_1^z + S_2^z$ operátor az egyik Bell állapotot éppen a másik Bell állapotba viszi át:

$$(S_1^z + S_2^z) |\psi^\pm\rangle = |\psi^\mp\rangle .$$

c) Miután beláttuk, hogy a két Bell állapot ortogonális egymásra, könnyen bizonyíthatjuk, hogy az $S = S_1^z + S_2^z$ operátor várható értéke eltűnik az állapotokon:

$$\langle \psi^\pm | S_1^z + S_2^z | \psi^\pm \rangle = \langle \psi^\pm | \psi^\mp \rangle = 0 .$$

d) Az $\mathbf{S}^2 = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2$ operátor átlagértékének a meghatározásához írjuk fel a Bell állapotokat az \mathbf{S}^2 sajátállapotai segítségével:

$$|\psi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 1\rangle \pm |1, -1\rangle) .$$

Nyilvánvaló, hogy a Bell állapotok $S = 1$ sajátállapotai az \mathbf{S}^2 operátornak, ezért a várható értéke megegyezik a sajátértékével:

$$\langle \psi^\pm | \mathbf{S}^2 | \psi^\pm \rangle = 2\hbar^2 .$$

5.15 Megoldás Vezessük be az új változókat:

$$X = x_1 + x_2 , \quad x = x_1 - x_2 .$$

Az 5.12. feladat megoldása szerint a kinetikus energiát a következőképpen írhatjuk fel az új változókkal:

$$\frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} = (\alpha^2 + \beta^2) \frac{P^2}{2m} + (\alpha^2 + \beta^2) \frac{p^2}{2m} ,$$

ahol az új impulzusok:

$$P = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial X} , \quad p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} .$$

Jelen esetben az együtthatók $\alpha = \beta = \gamma = 1$, $\delta = -1$. Fejezzük ki a potenciális energiát az új változókkal:

$$\frac{1}{2} m \omega^2 (x_1^2 + x_2^2) = \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{1}{4} ((X+x)^2 + (X-x)^2) = \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{1}{2} (X^2 + x^2)$$

Írjuk fel a teljes Hamilton operátort az új változókkal:

$$H = 2 \left(\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \left(\frac{\Omega}{2} \right)^2 \right) + 2 \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \left(\frac{\Omega^2}{4} + \frac{\omega^2}{2} \right) x^2 \right)$$

A Hamilton-operátor szétesett az új változóiban két független harmonikus oszcillátor Hamilton-operátorának az összegére

$$\omega_X = \frac{\Omega}{2} \quad \text{és} \quad \omega_x = \sqrt{\frac{\Omega^2}{4} + \frac{\omega^2}{2}} \quad (5.93)$$

karakterisztikus frekvenciával. A sajátállapotok energiái leolvashatóak a Hamilton-operátor alakjából:

$$E_{n_X, n_x} = 2\hbar\omega_X \left(n_X + \frac{1}{2} \right) + 2\hbar\omega_x \left(n_x + \frac{1}{2} \right),$$

maguk a sajátállapotok pedig a harmonikus oszcillátor megoldások szorzataiból állíthatók elő:

$$\Psi(X, x) = N_{n_X} H_{n_X} \left(\frac{X}{X_0} \right) e^{-\frac{X^2}{2X_0^2}} N_{n_x} H_{n_x} \left(\frac{x}{x_0} \right) e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}},$$

ahol

$$X_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_X}} \quad \text{és} \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_x}}, \quad (5.94)$$

valamint H_n a Hermite-polinom. Ha figyelembe vesszük a részecskék spinjét, akkor a teljes hullámfüggvénynek antiszimmetrikusnak kell lennie az x_1, x_2 koordináták felcserélésével szemben. A szingulet állapot spin sajátfüggvénye antiszimmetrikus, ezért a hullámfüggvény térbeli részének szimmetrikusnak kell lennie. Az X változó szimmetrikusan viselkedik a részecskék felcserélésével szemben, ezért a hullámfüggvény első tagja mindig szimmetrikus. Az x különbségi koordináta anitiszimmetrikus a felcseréléssel szemben, ezért a teljes hullámfüggvény térbeli része csak akkor lehet szimmetrikus, ha a második tag páros. A triplet hullámfüggvény esetében fordított a helyzet. Ebben az esetben a spin sajátfüggvény szimmetrikus és a térbeli résznek kell antiszimmetrikusnak lenni, amely csak akkor teljesül, ha a második tag páratlan.

5.16 Megoldás Keressük az $S = 0$ szingulet alapállapotot:

$$\Phi(r_1, r_2) = \phi(r_1)\phi(r_2) \left(\chi_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(1)\chi_{\frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}}(2) - \chi_{\frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}}(1)\chi_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(2) \right). \quad (5.95)$$

Miután szingulet állapotban a két részecskének ellenkező spinje van, nincsen közöttük kicserélődés és a HF egyenletet a következőképpen írhatjuk fel:

$$\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2 r^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 \langle \phi | (r - r')^2 | \phi \rangle \right) \phi_i(r) = \varepsilon_i \phi_i(r) \quad (5.96)$$

A HF egyenleteket önkonzisztens iterációval oldhatjuk meg. Kezdő egyrészecske hullámfüggvénynek válasszuk a kölcsönhatás mentes megoldást. Ekkor

$\langle \phi | r | \phi \rangle = 0$, $\langle \phi | r^2 | \phi \rangle = \frac{x_0^2}{2}$, ahol $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\Omega}}$. Helyettesítsük be a HF egyenletbe:

$$\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2 r^2 + \frac{1}{4}m\omega^2 x_0^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \right) \phi_i(r) = \varepsilon_i \phi_i(r) \quad (5.97)$$

vagyis:

$$\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m(\Omega^2 + \omega^2) r^2 \right) \phi_i(r) = (\varepsilon_i - \frac{1}{4}m\omega^2 x_0^2) \phi_i(r) \quad (5.98)$$

Az első iteráció után konvergál az önkonzisztens eljárás és egy olyan harmonikus oszcillátore Schrödinger egyenletét kaptuk, amelynek saját frekvenciája $\omega_0 = \sqrt{\Omega^2 + \omega^2}$ és az energiája eltolódott $\frac{1}{4}m\omega^2 x_0^2$ -tel.

6. fejezet

Közelítő módszerek a kvantummechanikában

6.1. Elmélet

6.1.1. Variációs módszer

Leggyakrabban a rendszer alapállapotú energiájának közelítő meghatározására szolgálnak a variációs módszerek, melyek alapja a Ritz féle variációs elv:

6.1. Tétel *Legyen H egy alulról korlátos, hermitikus operátor, melynek legalacsonyabb sajátértéke E_0 és az ehhez tartozó sajátállapot $|\varphi_0\rangle$. Ekkor bármely $|\psi\rangle$ állapotra az*

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (6.1)$$

funkcionálra fennáll, hogy $E[\psi] \geq E_0$.

Bizonyítás. Legyen $|\varphi_n\rangle$ ($n \in \mathbb{N}$) a H operátor teljes ortonormált sajátfüggvényrendszere: $H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$ és $E_n \geq E_0$. Mivel bármely $|\psi\rangle$ állapot előállítható $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle$ lineárokombinációval, ezért

$$E[\psi] = \frac{\sum_n |c_n|^2 E_n}{\sum_n |c_n|^2} \geq \frac{\sum_n |c_n|^2 E_0}{\sum_n |c_n|^2} = E_0 . \quad (6.2) \quad \square$$

A fenti tételből következik, hogy ha $|\psi\rangle$ valamely $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m\} \in \Lambda \subseteq \mathbb{R}^m$ paraméterek függvénye, akkor az $E(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m) \equiv E[\psi(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m)]$ függvényre is igaz, hogy

$$\min_{\Lambda} E(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m) \geq E_0 , \quad (6.3)$$

és a

$$\frac{\partial E(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m)}{\partial \lambda_k} = 0 \quad (k = 1, \dots, m) \quad (6.4)$$

egyenletrendszer $\{\lambda_1^*, \lambda_2^*, \dots, \lambda_m^*\}$ megoldásával nyert $E(\lambda_1^*, \lambda_2^*, \dots, \lambda_m^*)$ érték és $|\psi(\lambda_1^*, \lambda_2^*, \dots, \lambda_m^*)\rangle$ hullámfüggvény az alapállapot energiája és sajátfüggvény legjobb közelítése a Λ paraméterterén. Bizonyítható, hogy a paraméterek számának növelésével $E(\lambda_1^*, \lambda_2^*, \dots, \lambda_m^*)$ monoton csökken (és egyre jobban közelít E_0 -hoz).

6.2. Példa A 2.4. feladat megoldásából $L = 2a$ helyettesítés és eltolás után adódik, hogy a végtelen magas egydimenziós potenciáldoboz,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a \\ \infty & |x| \geq a \end{cases}, \quad (6.5)$$

alapállapota $\varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{\pi x}{2a}$, $E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$ sajátértékkel. A $\psi(\pm a) = 0$ határfeltételnek megfelelően vezessük be a

$$\psi_\lambda(x) = a^\lambda - |x|^\lambda \quad (6.6)$$

variációs függvényt. Ekkor

$$E(\lambda) = \frac{\langle \psi_\lambda | H | \psi_\lambda \rangle}{\langle \psi_\lambda | \psi_\lambda \rangle} = \frac{\hbar^2}{4ma^2} \frac{(\lambda + 1)(2\lambda + 1)}{(2\lambda - 1)}, \quad (6.7)$$

$$\frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} = \frac{\hbar^2}{4ma^2} \frac{4\lambda^2 - 4\lambda - 5}{(2\lambda - 1)^2} = 0 \implies \lambda_{\min} = \frac{1 + \sqrt{6}}{2} \simeq 1.7247 \quad (6.8)$$

↓

$$E(\lambda_{\min}) = 1.00298 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} = 1.00298 E_0. \quad (6.9)$$

6.1.2. Stacionárius perturbációszámítás

Tegyük fel, hogy ismerjük a H_0 Hamilton-operátor sajátértékeit és sajátfüggvényeit,

$$H_0 |\varphi_n^0\rangle = E_n^0 |\varphi_n^0\rangle \quad (n \in \mathbb{N}), \quad (6.10)$$

$$H_0 = \sum_n E_n^0 |\varphi_n^0\rangle \langle \varphi_n^0|. \quad (6.11)$$

Keressük a $H = H_0 + W$ perturbált Hamilton-operátor sajátérték problémájának megoldását. Ehhez a klasszikus perturbációszámításhoz hasonlóan (lásd: Keszthelyi Tamás: Mechanika jegyzete) bevezetjük a

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda W \quad (6.12)$$

operátort és a

$$(H_0 + \lambda W) |\psi_n\rangle(\lambda) = E_n(\lambda) |\psi_n\rangle(\lambda) \quad (n \in \mathbb{N}) \quad (6.13)$$

sajátérték egyenletet λ hatványai szerinti sorfejtéssel próbáljuk megoldani. A

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} |\psi_n\rangle(\lambda) = |\varphi_n^0\rangle \quad (6.14)$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} E_n(\lambda) = E_n^0 \quad (6.15)$$

határfeltételek miatt a következő alakot használjuk a hullámfüggvényre,

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\varphi_n^0\rangle + |\delta\psi_n(\lambda)\rangle, \quad (6.16)$$

ahol

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} |\delta\psi_n(\lambda)\rangle = 0. \quad (6.17)$$

A Rayleigh-Schrödinger-féle perturbációs számításban további feltételként megköveteljük, hogy a hullámfüggvény perturbatív korrekciója legyen ortogonális a perturbálatlan állapothoz:

$$\langle \varphi_n^0 | \delta\psi_n(\lambda) \rangle = 0. \quad (6.18)$$

A (6.13) egyenletet a $|\varphi_n^0\rangle$ sajátfüggvénnyel skalárszorozva,

$$\langle \varphi_n^0 | H_0 | \psi_n(\lambda) \rangle + \lambda \langle \varphi_n^0 | W | \psi_n(\lambda) \rangle = E_n(\lambda) \langle \varphi_n^0 | \psi_n(\lambda) \rangle \quad (6.19)$$

a (6.18) ortogonalitási feltételt felhasználva jutunk az alábbi összefüggéshez,

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \lambda \langle \varphi_n^0 | W | \psi_n(\lambda) \rangle. \quad (6.20)$$

A perturbált megoldást és energia sajátértéket λ hatványai szerint kifejtve,

$$|\delta\psi_n(\lambda)\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k |\psi_n^{(k)}\rangle \quad \text{és} \quad |\psi_n^{(0)}\rangle \equiv |\varphi_n^0\rangle \implies |\psi_n(\lambda)\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k |\psi_n^{(k)}\rangle \quad (6.21)$$

és

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k E_n^{(k)}, \quad (6.22)$$

majd ezeket a (6.20) egyenletbe helyettesítve,

$$\sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k E_n^{(k)} = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^{k+1} \langle \varphi_n^0 | W | \psi_n^{(k)} \rangle \quad (6.23)$$

kapjuk az energia korrekciókra vonatkozó alapvető összefüggést,

$$E_n^{(k)} = \langle \varphi_n^0 | W | \psi_n^{(k-1)} \rangle \quad (k = 1, 2, \dots). \quad (6.24)$$

Innen azonnal adódik az *elsőrendű energiakorrekció*:

$$E_n^{(1)} = \langle \varphi_n^0 | W | \varphi_n^0 \rangle. \quad (6.25)$$

Másodrendű energiakorrekció

A sajátfüggvény korrekcióinak kiszámításához részletesebben meg kell vizsgálnunk a (6.13) egyenlet λ szerinti sorfejtését:

$$(H_0 + \lambda W) \left(\sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k |\psi_n^{(k)}\rangle \right) = \left(\sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k E_n^{(k)} \right) \left(\sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k |\psi_n^{(k)}\rangle \right) \quad (6.26)$$

↓

$$\sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k (H_0 |\psi_n^{(k)}\rangle + W |\psi_n^{(k-1)}\rangle) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \left(\sum_{l=0}^k E_n^{(l)} |\psi_n^{(k-l)}\rangle \right) \quad (6.27)$$

↓

$$H_0 |\psi_n^{(k)}\rangle + W |\psi_n^{(k-1)}\rangle = \sum_{l=0}^k E_n^{(l)} |\psi_n^{(k-l)}\rangle \quad (k = 1, 2, \dots) \quad (6.28)$$

↓

$$(H_0 - E_n^0) |\psi_n^{(k)}\rangle = -W |\psi_n^{(k-1)}\rangle + \sum_{l=1}^k E_n^{(l)} |\psi_n^{(k-l)}\rangle . \quad (6.29)$$

Ezen egyenlet megoldása céljából behelyettesítjük H_0 és az I identitás operátor spektrál-felbontását,

$$\left(\sum_{i(\neq n)} (E_i^0 - E_n^0) |\varphi_i^0\rangle \langle \varphi_i^0| \right) |\psi_n^{(k)}\rangle = -W |\psi_n^{(k-1)}\rangle + \sum_{l=1}^k E_n^{(l)} |\psi_n^{(k-l)}\rangle , \quad (6.30)$$

ahol $\langle \varphi_n^0 | \psi_n^{(k)} \rangle = 0$ miatt a baloldalon az $i = n$ tag nyilvánvalóan eltűnik. A továbbiakban expliciten kihasználjuk, hogy az n -ik sajátfüggvény *nem-elfajult*, így bevezethető a következő operátor,

$$Q_n = \sum_{i(\neq n)} \frac{|\varphi_i^0\rangle \langle \varphi_i^0|}{E_i^0 - E_n^0} , \quad (6.31)$$

melyet a (6.30) egyenletre hattatunk. Felhasználva, hogy

$$Q_n \left(\sum_{i(\neq n)} (E_i^0 - E_n^0) |\varphi_i^0\rangle \langle \varphi_i^0| \right) |\psi_n^{(k)}\rangle = \left(\sum_{i(\neq n)} |\varphi_i^0\rangle \langle \varphi_i^0| \right) |\psi_n^{(k)}\rangle = |\psi_n^{(k)}\rangle , \quad (6.32)$$

kapjuk a sajátfüggvény korrekcióinak rekurziós relációját:

$$|\psi_n^{(k)}\rangle = -Q_n W |\psi_n^{(k-1)}\rangle + \sum_{l=1}^k E_n^{(l)} Q_n |\psi_n^{(k-l)}\rangle , \quad (6.33)$$

mely az (6.24) egyenlettel együtt alkalmas, hogy az sajátenergia és sajátfüggvények korrekcióit tetszőleges rendben meghatározzuk.

A sajátfüggvény elsőrendű korrekciója könnyen megkapható, mivel az (6.33) egyenlet jobb oldalán csak az első tagot kell tekintenünk:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = -Q_n W |\psi_n^{(0)}\rangle = - \sum_{i(\neq n)} \frac{\langle \varphi_i^0 | W | \varphi_n^0 \rangle}{E_i^0 - E_n^0} |\varphi_i^0\rangle , \quad (6.34)$$

és a sajátenergia másodrendű korrekciója:

$$E_n^{(2)} = \langle \varphi_n^0 | W |\psi_n^{(1)}\rangle = - \sum_{n(\neq i)} \frac{\langle \varphi_n^0 | W | \varphi_i^0 \rangle \langle \varphi_i^0 | W | \varphi_n^0 \rangle}{E_i^0 - E_n^0} . \quad (6.35)$$

Elsőrendű degenerált perturbációszámítás

Ha az n -ik sajátérték M -szeresen degenerált, akkor H_0 spektrálfelbontását a

$$H_0 = \sum_{\mu=1}^M E_n^0 |\varphi_{n\mu}^0\rangle \langle \varphi_{n\mu}^0| + \sum_{i(E_i^0 \neq E_n^0)} E_i^0 |\varphi_i^0\rangle \langle \varphi_i^0| \quad (6.36)$$

alakban írjuk fel. A nem elfajult esettel szemben az az alapvető különbség, hogy a nulladrendű perturbált hullámfüggvényt a degenerált perturbálatlan sajátfüggvények lineárkombinációjaként vesszük fel:

$$|\psi_n^{(0)}\rangle = \sum_{\mu=1}^M c_\mu |\varphi_{n\mu}^0\rangle . \quad (6.37)$$

Az elsőrendű kifejezéseket,

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle , \quad \langle \varphi_{n\mu}^0 | \psi_n^{(1)} \rangle = 0 , \quad (6.38)$$

és

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \lambda E_n^{(1)} , \quad (6.39)$$

behelyettesítve a (6.13) Schrödinger egyenletbe,

$$(H_0 + \lambda W) (|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle) = (E_n^0 + \lambda E_n^{(1)}) (|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle) , \quad (6.40)$$

a λ -ban nulladrendű tagok kiesnek, míg az elsőrendű tagokra fennáll, hogy

$$H_0 |\psi_n^{(1)}\rangle + W |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^0 |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle . \quad (6.41)$$

Kihasználva, hogy a sajátfüggvény elsőrendű korrekciója ortogonális a degenerált perturbálatlan altérre, a

$$\langle \varphi_{n\mu}^0 | W |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(1)} \langle \varphi_{n\mu}^0 | \psi_n^{(0)}\rangle \quad (\mu = 1, \dots, M) \quad (6.42)$$

egyenleteket nyerjük. Behelyettesítve a (6.37) kifejtést, a

$$\sum_{\nu=1}^M \langle \varphi_{n\mu}^0 | W |\varphi_{n\nu}^0\rangle c_\nu = E_n^{(1)} c_\mu \quad (6.43)$$

↓

$$\sum_{\nu=1}^M (\langle \varphi_{n\mu}^0 | W |\varphi_{n\nu}^0\rangle - E_n^{(1)} \delta_{\mu\nu}) c_\nu = 0 \quad (6.44)$$

egyenleteket kapjuk. Bevezetve a perturbáció mátrixát,

$$W_{\mu\nu} = \langle \varphi_{n\mu}^0 | W |\varphi_{n\nu}^0\rangle , \quad \underline{W} = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} & & \\ W_{21} & W_{22} & & \\ & & \dots & \\ & & & W_{MM} \end{pmatrix} , \quad (6.45)$$

és a kifejtési együtthatókból képzett oszlopvektort,

$$\underline{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_M \end{pmatrix}, \quad (6.46)$$

az elsőrendű energiakorrekciót a

$$\underline{W} \underline{c} = E_n^{(1)} \underline{c}, \quad (6.47)$$

sajátértékegyenlet ill. a

$$\det(\underline{W} - E_n^{(1)} \underline{I}) = 0 \quad (6.48)$$

szekuláris egyenlet megoldásai szolgáltatják.

6.1.3. Időfüggő perturbációszámítás

Igen sok esetben (pl. be- és kikapcsolási jelenségek, gerjesztés EM térrel), a perturbáció az idő explicit függvénye,

$$H(t) = H_0 + W(t), \quad (6.49)$$

ezért az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldásait kell keresnünk:

$$i\hbar\partial_t |\psi_n(t)\rangle = (H_0 + W(t)) |\psi_n(t)\rangle. \quad (6.50)$$

Feltételezzük, hogy valamely t_0 időpont előtt $W(t) = 0$ és az állapot időfejlődése H_0 sajátállapotából indul,

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\psi_n(t)\rangle = |\varphi_n^0\rangle. \quad (6.51)$$

Mivel H_0 sajátállapotainak időfüggettsége,

$$|\varphi_i^0(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_i^0 t} |\varphi_i^0\rangle, \quad (6.52)$$

célszerű a $|\psi_n(t)\rangle$ megoldást a

$$|\psi_n(t)\rangle = \sum_i e^{-\frac{i}{\hbar}E_i^0 t} c_i(t) |\varphi_i^0\rangle, \quad (6.53)$$

alakban felvenni, ahol a (6.51) határfeltétel miatt,

$$\lim_{t \rightarrow t_0} c_i(t) = \delta_{in}. \quad (6.54)$$

A hullámfüggvény kifejtését behelyettesítve az időfüggő Schrödinger egyenletbe kapjuk, hogy

$$\sum_i (E_i^0 c_i(t) + i\hbar\dot{c}_i(t)) e^{-\frac{i}{\hbar}E_i^0 t} |\varphi_i^0\rangle = \sum_i (E_i^0 + W(t)) c_i(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_i^0 t} |\varphi_i^0\rangle, \quad (6.55)$$

(ahol $\dot{c}_i(t) = \frac{dc_i(t)}{dt}$), majd kihasználva a perturbálatlan stacionárius sajátfüggvények ortonormalitását, az

$$(E_k^0 c_k(t) + i\hbar\dot{c}_k(t)) e^{-\frac{i}{\hbar}E_k^0 t} = \sum_i (E_i^0 \delta_{ki} + W_{ki}(t)) c_i(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_i^0 t} \quad (6.56)$$

↓

$$i\hbar\dot{c}_k(t) = \sum_i W_{ki}(t) c_i(t) e^{i\omega_{ki}t} \quad (6.57)$$

differenciálegyenlethez jutunk, ahol

$$W_{ki}(t) = \langle \varphi_k^0 | W(t) | \varphi_i^0 \rangle \quad (6.58)$$

és

$$\omega_{ki} = \frac{E_k^0 - E_i^0}{\hbar} . \quad (6.59)$$

A (6.51) kezdeti feltétel figyelembevételével, a kifejtési együtthatókra ($t \geq t_0$) a következő integrálegyenletet kapjuk:

$$c_k(t) = \delta_{kn} + \frac{1}{i\hbar} \sum_i \int_{t_0}^t W_{ki}(\tau) c_i(\tau) e^{i\omega_{ki}\tau} d\tau . \quad (6.60)$$

A megoldást szukcesszív approximációval keressük. Nulladrendben:

$$c_k(t) = c_k^{(0)}(t) = \delta_{kn} , \quad (6.61)$$

elsőrendben:

$$c_k(t) = c_k^{(0)}(t) + c_k^{(1)}(t) = \delta_{kn} + c_k^{(1)}(t) , \quad (6.62)$$

$$c_k^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_i \int_{t_0}^t W_{ki}(\tau) c_i^{(0)}(t) e^{i\omega_{ki}\tau} d\tau = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t W_{kn}(\tau) e^{i\omega_{kn}\tau} d\tau , \quad (6.63)$$

és bármely M -edrendben,

$$c_k(t) = \delta_{kn} + \sum_{r=1}^M c_k^{(r)}(t) , \quad (6.64)$$

$$c_k^{(r)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_i \int_{t_0}^t W_{ki}(\tau) c_i^{(r-1)}(\tau) e^{i\omega_{ki}\tau} d\tau \quad (6.65)$$

$$= \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^r \sum_{i_1, \dots, i_r} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{r-1}} dt_r W_{ki_1}(t_1) e^{i\omega_{ki_1}t_1} \dots W_{i_{r-1}i_r}(t_r) e^{i\omega_{i_{r-1}i_r}t_r} . \quad (6.66)$$

Általában megelégszünk az elsőrendű megoldással és azt vizsgáljuk, milyen valószínűséggel található a rendszer a t időpillanatban a k -ik sajátállapotban ($k \neq n$):

$$P_{n \rightarrow k}^{(1)}(t) = |\langle \varphi_k^0 | \psi_n(t) \rangle|^2 = |c_k^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t W_{kn}(\tau) e^{i\omega_{kn}\tau} d\tau \right|^2 . \quad (6.67)$$

Időfüggő perturbációszámítás alkalmazása, Fermi-féle aranyszabály

Időben periodikusan változó potenciál (pl. elektromos tér) hirtelen bekapcsolása esetén a perturbáció:

$$W(\mathbf{r}, t) = \Theta(t) e \mathcal{E} \mathbf{r} \cos \omega t = \Theta(t) W(\mathbf{r}) (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (6.68)$$

$$W(\mathbf{r}) = \frac{e \mathcal{E} \mathbf{r}}{2}, \quad (6.69)$$

és a perturbáció mátrixelemei,

$$W_{kn}(t) = W_{kn} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \quad (6.70)$$

ahol

$$W_{kn} = \langle \varphi_k^0 | W | \varphi_n^0 \rangle = \frac{1}{2} e \mathcal{E} \langle \varphi_k^0 | \mathbf{r} | \varphi_n^0 \rangle. \quad (6.71)$$

Az időfüggő részt kiintegrálva,

$$W_{kn} = \int_0^t W_{kn}(\tau) e^{i\omega_{kn}\tau} d\tau = W_{kn} \int_0^t (e^{i(\omega_{kn}+\omega)\tau} + e^{i(\omega_{kn}-\omega)\tau}) d\tau \quad (6.72)$$

$$= W_{kn} \left(\frac{e^{i(\omega_{kn}+\omega)t} - 1}{i(\omega_{kn} + \omega)} + \frac{e^{i(\omega_{kn}-\omega)t} - 1}{i(\omega_{kn} - \omega)} \right) \quad (6.73)$$

$$= W_{kn} \left(e^{i[\omega_{kn}+\omega]t/2} \frac{\sin [(\omega_{kn} + \omega) t/2]}{(\omega_{kn} + \omega) / 2} + e^{i[\omega_{kn}-\omega]t/2} \frac{\sin [(\omega_{kn} - \omega) t/2]}{(\omega_{kn} - \omega) / 2} \right), \quad (6.74)$$

az átmeneti valószínűségre az alábbi kifejezést kapjuk,

$$P_{n \rightarrow k}^{(1)}(t) = \frac{|W_{kn}|^2}{\hbar^2} \left| e^{i[\omega_{kn}+\omega]t/2} \frac{\sin [(\omega_{kn} + \omega) t/2]}{(\omega_{kn} + \omega) / 2} + e^{i[\omega_{kn}-\omega]t/2} \frac{\sin [(\omega_{kn} - \omega) t/2]}{(\omega_{kn} - \omega) / 2} \right|^2. \quad (6.75)$$

Ha az átmeneti valószínűséget ω függvényében vizsgáljuk, akkor $t \gg 2\pi/\omega$ esetén két spektrális csúcsot látunk:

$$\omega \approx \begin{cases} \omega_{kn} & \implies E_k^0 \approx E_n^0 + \hbar\omega & \text{abszorpció} \\ -\omega_{kn} & \implies E_k^0 \approx E_n^0 - \hbar\omega & \text{indukált emisszió} \end{cases}, \quad (6.76)$$

és a csúcsok félértékszélessége,

$$\Delta\omega = 4\pi/t \implies \Delta E = \frac{2\hbar}{t}. \quad (6.77)$$

Ha $4\pi/t \ll 2\omega_{kn} \implies t \gg 2\pi/\omega_{kn}$, a két spektrális csúcs szétválik és az átmeneti valószínűséget felírhatjuk a két járulék összegeként,

$$P_{i \rightarrow k}^{(1)}(t) = \frac{|W_{ki}|^2}{\hbar^2} \left(\frac{\sin^2 [(\omega_{ki} + \omega) t/2]}{[(\omega_{ki} + \omega) / 2]^2} + \frac{\sin^2 [(\omega_{ki} - \omega) t/2]}{[(\omega_{ki} - \omega) / 2]^2} \right) \quad (6.78)$$

$$= \frac{|W_{ki}|^2}{\hbar^2} \left(\frac{\sin^2 [(\omega_{ki} + \omega) t/2]}{[(\omega_{ki} + \omega) t/2]^2} + \frac{\sin^2 [(\omega_{ki} - \omega) t/2]}{[(\omega_{ki} - \omega) t/2]^2} \right) t^2. \quad (6.79)$$

Felhasználva az

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(\alpha t)}{\pi \alpha^2 t} d\alpha \stackrel{y=\alpha t}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 y}{y^2} dy = \pi \rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(\alpha t)}{\pi \alpha^2 t} = \delta(\alpha) , \quad (6.80)$$

azonosságot,

$$P_{i \rightarrow k}^{(1)}(t) = \frac{|W_{ki}|^2}{\hbar^2} \pi \left(\delta \left(\frac{1}{2\hbar} [E_k^0 - E_n^0 + \hbar\omega] \right) + \delta \left(\frac{1}{2\hbar} [E_k^0 - E_n^0 - \hbar\omega] \right) \right) t \quad (6.81)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} |W_{ki}|^2 \left(\delta(E_k^0 - E_n^0 + \hbar\omega) + \delta(E_k^0 - E_n^0 - \hbar\omega) \right) t . \quad (6.82)$$

Ezt az eredményt nevezzük *Fermi-féle arany szabálynak*, miszerint az átmeneti valószínűség lineárisan arányos az eltelt idővel,

$$P_{n \rightarrow k}^{(1)}(t) \approx w_{n \rightarrow k} t , \quad (6.83)$$

ahol az *időegységre jutó átmeneti valószínűség*,

$$w_{n \rightarrow k} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{kn}|^2 \left(\delta(E_k^0 - E_n^0 + \hbar\omega) + \delta(E_k^0 - E_n^0 - \hbar\omega) \right) . \quad (6.84)$$

A $t = 0$ időpillanatban bekapcsolt konstans perturbációra, $W(\mathbf{r}, t) = W(\mathbf{r}) \Theta(t)$,

$$w_{n \rightarrow k} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{kn}|^2 \delta(E_k^0 - E_n^0) , \quad (6.85)$$

azaz a perturbációs számítás első rendjében nem történik energiaátadás a gerjesztő tér és a gerjesztett rendszer között.

6.2. Feladatok

6.2.1. Példák

6.1. Feladat Keressük meg a lineáris harmonikus oszcillátor

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (6.86)$$

alapállapot energiáját és sajátállapotát! Legyen a hullámfüggvény

$$\psi(x) = Ne^{-cx^2} \quad (6.87)$$

alakú ($c > 0$)! Határozzuk meg a c paraméter értékét és az energiát variációs módszerrel!

6.2. Feladat Keressük meg a hidrogénatom,

$$H = \frac{1}{2m}p_r^2 + \frac{L}{2mr^2} - \frac{\alpha}{r}, \quad (6.88)$$

alapállapot energiáját és sajátállapotát! Legyen a hullámfüggvény

$$\psi(r) = Ne^{-\beta r} \quad (6.89)$$

alakú ($\beta > 0$)! Határozzuk meg a β paraméter értékét és az energiát variációs módszerrel!

6.3. Feladat Végtelen mély egydimenziós potenciálgödörhöz,

$$V_0(x) = \begin{cases} \infty & \text{ha } |x| > a \\ 0 & \text{ha } |x| \leq a \end{cases} \quad (6.90)$$

a következő perturbáció

$$V_1(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } |x| > b \\ -V & \text{ha } |x| \leq b \end{cases} \quad (6.91)$$

társul ($a > b > 0$, $V > 0$). Határozzuk meg az energia sajátértékek eltolódását a perturbációs számítás első rendjében! Vizsgáljuk a $b = a$, valamint a $b \ll a$ esetet első rendben! Vizsgáljuk a $V < 0$ esetet is és a perturbációs számítás alkalmazhatóságának feltételét is!

Segítség:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a} - \frac{n\pi}{2}\right) \quad L = 2a \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2 \quad (6.92)$$

6.4. Feladat A 6.3. feladatbeli perturbáló potenciálnál csökkentjük b értékét zérushoz és a V értékét növeljük végtelen nagyra úgy, hogy közben a szorzatuk maradjon állandó: $K = Vb$. Ennek megfelelően a perturbáló potenciál Dirac-delta alakú lesz:

$$V_1(x) = -K\delta(x). \quad (6.93)$$

Számítsuk ki az energiaszintek elsőrendű megváltozását és vessük össze ezt az eredményt a 2.8 megoldással az alapállapotra!

6.5. Feladat Tekintsünk egy kétdimenziós harmonikus oszcillátort,

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2), \quad (6.94)$$

melyre $W = \frac{1}{2}m\omega^2\alpha xy$ perturbáló potenciál hat. Hogyan módosul az első gerjesztett állapot energiája a perturbációszámítás első rendjében? (Használjuk a léptető operátorokat, $x = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(a^+ + a)$, ahol $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$) Hasonlítsuk össze a fenti eredményt a 2.18 egzakt megoldással $\alpha \ll 1$ határesetben!

6.6. Feladat A perturbációszámítás első rendjében számítsuk ki a hidrogénatom energiaszintjeinek felhasadását, amennyiben figyelemmel vagyunk a mag véges méretére!

$$H = H_0 + V(r), \quad (6.95)$$

ahol

$$H_0 = \frac{1}{2m}p_r^2 + \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{\alpha}{r} \quad (6.96)$$

a hidrogénatom (perturbálatlan) Hamilton-operátora, a perturbáló potenciál pedig:

1. egy R sugarú vezető gömbhöz tartozó

$$\begin{cases} V(r) = -\frac{\alpha}{R} + \frac{\alpha}{r}, & 0 < r < R, \\ V(r) = 0, & 0 < r < R \end{cases} \quad (6.97)$$

2. egy R sugarú szigetelő gömbhöz tartozó

$$\begin{cases} V(r) = -\frac{\alpha}{2R} \left(3 - \frac{r^2}{R^2} \right), & 0 < r < R, \\ V(r) = 0, & 0 < r < R \end{cases} \quad (6.98)$$

Legyen $R/a_0 = 10^{-3}$. Mely állapotok hasadnak fel?

6.7. Feladat Számítsuk ki hogyan hasad fel a hidrogénatom spektruma, ha az elektronok leárnyékolt (Yukawa) potenciálban mozognak! Legyen a Yukawa-potenciálban szereplő α árnyékolási tényező igen kicsi, α^{-1} igen nagy! Fejtsük sorba a potenciált α -ban másodrendig!

$$V(r) = -k \frac{e^2}{r} e^{-\alpha r} \quad (6.99)$$

6.8. Feladat Határozza meg egy L élhosszúságú potenciáldobozba,

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{ha } (x, y, z) \in [0, L]^3 \\ \infty & \text{egyébként} \end{cases}, \quad (6.100)$$

zárt m tömegű, e töltésű részecske energiaszintjeinek korrekcióját a perturbáció számítás első rendjében, ha a dobozt z irányú, homogén elektromos térbe helyezzük!

Segítség:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (6.101)$$

$$\psi_{n_x, n_y, n_z} = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{3}{2}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{L} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{L} z\right) \quad (6.102)$$

$$V = -ez\mathcal{E} \quad (6.103)$$

6.9. Feladat Egy $S = 1$ spinű rendszer Hamilton-operátora legyen

$$H_0 = aS_z + bS_z^2 \quad (a, b > 0) . \quad (6.104)$$

Határozzuk meg az energiaszinteket!

A rendszert $\mathbf{B} = B\mathbf{n}$ ($\mathbf{n}^2 = 1$) homogén mágneses térbe helyezve tekintsük a

$$W = \omega \mathbf{S} \mathbf{n} \quad \left(\omega = \frac{2\mu_B B}{\hbar}\right) \quad (6.105)$$

kölcsönhatást perturbációnak! Írjuk fel a perturbáció mátrixát! Határozzuk meg az energiaszintek korrekcióját első rendben, különös tekintettel az $a = b$ esetre!

6.10. Feladat Hogyan módosul a hidrogénatom alapállapotának, $\psi_{100}(\mathbf{r}) = 1/\sqrt{\pi a_0^3} \exp(-r/a_0)$, az energiája a perturbáció számítás első rendjében, ha homogén z -irányú mágneses térbe helyezzük? Dolgozzunk szimmetrikus mértékben ($A = \frac{1}{2}(-By, Bx, 0)$)!

6.11. Feladat Hogyan hasad fel a hidrogénatom $n=2$ -es főhéja homogén, z irányú elektromos térben a perturbációszámítás első rendjében (elsőrendű Stark effektus)? Számítsuk ki a felhasadás mértékét is!

Segítség:

$$\psi_{200}(\vec{r}) = \frac{2}{(2a_0)^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) Y_0^0(\vartheta, \varphi) ,$$

$$\psi_{21m}(\vec{r}) = \frac{2}{\sqrt{3}(2a_0)^{3/2}} \frac{r}{2a_0} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) Y_1^m(\vartheta, \varphi) ,$$

$$Y_0^0(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} , Y_1^0(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\vartheta) ,$$

$$Y_1^{-1}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\vartheta) \exp(-i\varphi) , Y_1^1(\vartheta, \varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\vartheta) \exp(i\varphi) ,$$

$$\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x} dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}} , \quad E_{nlm} = -\frac{\alpha}{2n^2} .$$

6.12. Feladat Számítsuk ki az izotróp, kétdimenziós oszcillátor alapállapotú szuszceptibilitását merőleges, B mágneses térben elsőrendű perturbációszámítást alkalmazva! Használjunk szimmetrikus mértéket! Oldjuk meg a problémát egzaktul is, és vessük össze a két eredményt! Milyen feltételt róhatunk ki a perturbatív közelítés alkalmazhatóságára?

6.13. Feladat Legyen adott egy kétállapotú rendszer: $H_0 = \varepsilon \sigma_z$. Vizsgáljuk a $V = J \sigma_x$ alakú perturbációt! (σ_z és σ_x z és x irányú Pauli mátrixokat jelölnék.) Számítsuk ki a legalacsonyabb rendű korrekciót és vessük össze a $H = H_0 + V$ egzakt sajátenergiáival!

6.14. Feladat A síkbeli rotátor Hamilton operátora

$$H_0 = \frac{L_z^2}{2\Theta} = -\frac{\hbar^2}{2\Theta} \frac{d^2}{d\varphi^2} \quad (6.106)$$

Egy P elektromos dipólmomentummal rendelkező rotátort helyezünk x irányú homogén, \mathcal{E} erősségű elektromos térbe,

$$H_1 = -P\mathcal{E} \cos \varphi ! \quad (6.107)$$

Határozza meg a rotátor energiaszintjeit a perturbációszámítás második rendjéig!

6.15. Feladat A térbeli rotátor Hamilton operátora

$$H_0 = \frac{L^2}{2\Theta} . \quad (6.108)$$

Egy P elektromos dipólmomentummal rendelkező rotátort helyezünk z irányú homogén, \mathcal{E} erősségű elektromos térbe,

$$H_1 = -P\mathcal{E} \cos \vartheta ! \quad (6.109)$$

Hogyan módosul a rotátor alapállapotú energiája a perturbációszámítás második rendjéig!

6.16. Feladat Helyezzünk egy háromdimenziós, izotróp térbeli harmonikus oszcillátort z irányú. \mathcal{E} erősségű elektromos térbe. Elsőrendű pertrubáció számítás segítségével határozzuk meg a rendszer P polarizálhatóságát (elektromos dipólmentumát) és $\chi_{\mathcal{E}}$ elektromos szuszeptibilitását!

Segítség:.

$$P = e \langle \Psi | x | \Psi \rangle ; \quad \chi_{\mathcal{E}} = \left. \frac{\partial P}{\partial \mathcal{E}} \right|_{\mathcal{E}=0}$$

6.17. Feladat Adott egy centrális potenciálban mozgó elektron $\ell = 1$ mellékkvantumszámú (hatszorosan degenerált) energiaszintje.

$$H_0 \psi_{1mm_s}^{(0)}(\mathbf{r}) = E^{(0)} \psi_{1mm_s}^{(0)}(\mathbf{r}) \quad , \quad (6.110)$$

ahol $\psi_{1mm_s}^{(0)}(\mathbf{r}) = R_1(r) Y_1^m(\vartheta, \varphi) \phi_{1/2}^{m_s}$. Hogyan hasad fel ez az energiaszint a $H_1 = \xi \mathbf{L} \mathbf{S}$ perturbáció (spin-pálya kölcsönhatás) hatására? (A perturbációszámítás első rendje itt megegyezik az egzakt megoldással.)

1. Megoldás: Határozza meg H_1 hatását a perturbálatlan hullámfüggvényekre és írja fel H_1 mátrixát! A mátrix igen egyszerű struktúráját szem előtt tartva oldja meg a szekuláris egyenletet és határozza meg az új sajátfüggvényeket!

2. Megoldás: Lásza be, hogy $[J^2, H_1] = 0$ és $[J_z, H_1] = 0$, ahol $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$! Határozza meg ez alapján $H_0 + H_1$ sajátfüggvényeit és számítsa ki az új energiaszinteket!

6.18. Feladat Hidrogénatomot egy kisülés alatt lévő kondenzátor lemezei közé juttatunk. A külső, z irányú elektromos tér tehát az

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 e^{-t/\tau} \Theta(t) \quad (6.111)$$

függvénnyel írható le. Milyen valószínűséggel gerjesztődik az elektron az $n=1$ -es állapotból az $n=2$ -es állapotba? Vizsgáljuk meg a $\tau \rightarrow \infty$ határesetet és vessük össze az eredményt a Fermi-féle aranyszabály alkalmazásával kapott átmeneti valószínűséggel!

6.19. Feladat Egy e töltésű lineáris harmonikus oszcillátort

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) \quad (6.112)$$

időben változó elektromos térbe tesszük. Az oszcillátor $t = -\infty$ -ben alapállapotban volt. Az időfüggő perturbációszámítás első rendjében mi a valószínűsége annak, hogy az oszcillátort $t = \infty$ -ben az első gerjesztett állapotban találjuk?

6.20. Feladat Egy q töltésű részecske lineáris harmonikus potenciálban mozog,

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \quad (6.113)$$

A $t = 0$ pillanatban (x irányú) homogén elektromos teret kapcsolunk be, amit a $t = t_0$ pillanatban kikapcsolunk. Számítsa ki a kezdetben alapállapotban lévő részecske valamely gerjesztett állapotba történő átmenetének valószínűségét az időfüggő perturbációszámítás első rendjében $t > t_0$ esetén!

6.21. Feladat Egy egydimenziós, L élhosszúságú, végtelen mély potenciál gödörben lévő részecske alapállapotban van. Mi a valószínűsége annak, hogy a rendszer az n -ik gerjesztett állapotba kerül, ha τ ideig \mathcal{E} nagyságú homogén elektromos teret kapcsolunk be?

Segítség:

$$|n\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad (6.114)$$

6.22. Feladat Határozzuk meg az időben változó, homogén elektromos térbe helyezett, kezdetben az n -edik gerjesztett állapotban lévő harmonikus oszcillátor P dipólus momentumát és $\chi_{\mathcal{E}}(\omega)$ elektromos dinamikus szuszceptibilitását (polarizálhatóságát) az időfüggő perturbáció számítás első rendjében! A perturbáló potenciál \mathcal{E} nagyságú térben a következő alakú:

$$V(x, t) = \begin{cases} e\mathcal{E}x e^{\alpha t} \sin(\omega t) & \text{ha } t < 0 \\ e\mathcal{E}x \sin(\omega t) & \text{ha } t \geq 0 \end{cases} \quad (6.115)$$

A szükséges időintegrálok elvégzése után tekintsük az $\alpha \rightarrow 0$ limeszt! Hasonlítsuk össze az eredményt $\omega \rightarrow 0$ esetén az időfüggetlen eset (6.16. feladat) megoldásával!

Segítség:

$$P(t) = e \langle \psi(t) | x | \psi(t) \rangle \quad \chi_{\mathcal{E}}(\omega) = \left. \frac{\partial \tilde{P}(\omega)}{\partial \mathcal{E}} \right|_{\mathcal{E}=0} \quad (6.116)$$

ahol $\tilde{P}(\omega)$ a $P(t)$ Fourier-transzformáltja.

6.23. Feladat Határozzuk meg az időben változó, homogén elektromos térbe helyezett, kezdetben az n -edik gerjesztett állapotban lévő harmonikus oszcillátor P dipólus momentumát és $\chi_{\mathcal{E}}(\omega)$ elektromos dinamikus szuszceptibilitását (polarizálhatóságát) az időfüggő perturbáció számítás első rendjében! A perturbáló potenciál \mathcal{E} nagyságú térben a következő alakú:

$$V(x, t) = \begin{cases} 0 & \text{ha } t < 0 \\ e\mathcal{E}_0 x e^{-\alpha t} \sin(\omega t) & \text{ha } t \geq 0 \end{cases} \quad (6.117)$$

6.2.2. Megoldások

6.1 Megoldás

$$N = \left(\frac{2c}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \quad (6.118)$$

$$\langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle = \frac{m\omega^2}{8c} + \frac{c\hbar^2}{2m} \quad (6.119)$$

$\langle E \rangle$ minimális, ha $c = \frac{m\omega}{2\hbar}$, azaz $\langle T \rangle = \langle V \rangle$, tehát

$$\psi(x) = \left(\frac{2c}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega^2}{\hbar^2}x^2} \text{ ill. } \langle E \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} = E_0 \quad (6.120)$$

6.2 Megoldás

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} N^2 \int_0^{\infty} 4\pi r^2 e^{-\beta r} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] e^{-\beta r} dr = \frac{\hbar^2 N^2 \pi}{2m\beta} \quad (6.121)$$

$$\langle V \rangle = -\alpha \int_0^{\infty} 4\pi r^2 \frac{1}{r} e^{-2\beta r} dr = -\frac{\pi\alpha}{\beta^2} \quad (6.122)$$

$$\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle = \frac{\hbar^2 N^2 \pi}{2m\beta} - \frac{\pi\alpha}{\beta^2} \quad (6.123)$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = N^2 \int_0^{\infty} 4\pi r^2 e^{-2\beta r} dr = \frac{N^2 \pi}{\beta^2} \quad (6.124)$$

$$E[\beta] = \frac{\langle H \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} - \beta\alpha \quad (6.125)$$

$$\frac{dE[\beta]}{d\beta} = \frac{\hbar^2 \beta}{m} - \alpha = 0 \quad \Rightarrow \quad \beta = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \quad (6.126)$$

$$E_0 = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}, \quad (6.127)$$

amely eredmény megegyezik a hidrogén alapállapot energiájával.

6.3 Megoldás

$$\delta E_n = V_0 \frac{b}{a} - V_0 \frac{(-1)^n}{n\pi} \sin\left(\frac{bn\pi}{a}\right) \quad (6.128)$$

$$b = a : \delta E_0 = V_0 \quad \delta E_0 = V_0 \frac{b}{a} (1 - (-1)^n) = \begin{cases} V_0 \frac{2b}{a}, & \text{ha } n = 2k \\ 0, & \text{ha } n = 2k + 1 \end{cases} \quad (6.129)$$

Alkalmazhatóság feltétele:

$$\delta E_1 \ll E_2 - E_1 \Rightarrow V_0 b \ll \frac{3\hbar^2 \pi^2}{8ma} \quad (6.130)$$

6.4 Megoldás

$$\delta E_n = -\frac{K}{a} \int_{-a}^a |\psi(x)|^2 \delta(x) dx = -\frac{K}{a} \int_{-a}^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{2a} - \frac{n\pi}{2}\right) \delta(x) dx = \begin{cases} -\frac{K}{a}, & \text{ha } n = 2k + 1 \\ 0, & \text{ha } n = 2k \end{cases} \quad (6.131)$$

Alkalmazhatóság feltétele:

$$\delta E_1 \ll E_2 - E_1 \Rightarrow K \ll \frac{3\hbar^2 \pi^2}{8ma} \quad (6.132)$$

Vessük össze ezt az eredményt a 2.8 megoldással az alapállapotra! Az energia $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. A k -ra pedig a (2.128) egyenletben azt kaptuk, hogy

$$ka = \frac{m}{\hbar^2} Ka \tan(ka) \quad \Rightarrow \quad \frac{ka}{\tan(ka)} = \frac{m}{\hbar^2} Ka, \quad (6.133)$$

ami egy transzcendens egyenlet. A megoldás az alapállapotban $ka \in [0 : \pi/2]$. Kis K esetén a jobb oldal kicsi, bal oldal $\pi/2$ -nél nulla, így ekörül sorba fejtve közelítő megoldást kaphatunk k -ra:

$$\frac{ka}{\tan(ka)} \approx -\frac{\pi}{2} \left(ka - \frac{\pi}{2}\right) = \frac{m}{\hbar^2} Ka \quad \Rightarrow \quad k = \frac{\pi}{2a} - \frac{2m}{\hbar^2 \pi} K \quad (6.134)$$

Innen az energia K -ban első rendig:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} - \frac{K}{a} \quad (6.135)$$

Mivel potenciáldoboz esetén az alapállapot energiája $\frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$, a fenti eredmény megegyezik az elsőrendű perturbációs számítás eredményével.

6.5 Megoldás Vezessük be az x irányban n -edik, y irányban m -edik egydimenziós gerjesztett állapot szorzatára az $|n, m\rangle$ jelölést! Világos, hogy ekkor

$$a_x |n, m\rangle = \sqrt{n} |n-1, m\rangle \quad a_y |n, m\rangle = \sqrt{m} |n, m-1\rangle \quad (6.136)$$

Az x és y irányú keltő és eltüntető operátorokkal felírva a Hamiltonit és a perturbáló potenciált:

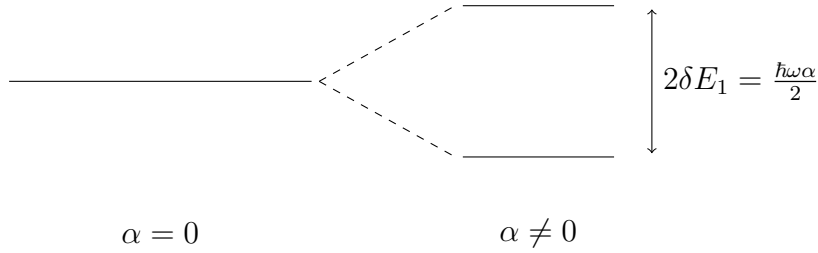
$$H_0 = \hbar\omega (a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + 1) \quad W = \frac{m\omega^2}{2} \frac{\alpha x_0^2}{2} (a_x^\dagger + a_x) (a_y^\dagger + a_y) \quad (6.137)$$

W mátrixa a $(|0,1\rangle, |1,0\rangle)$ bázison:

$$W = \frac{\hbar\omega\alpha}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar\omega\alpha}{4} \sigma_x \quad (6.138)$$

Ennek sajátértékei:

$$\delta E_1^{(1)} = \pm \frac{\hbar\omega\alpha}{4} \quad (6.139)$$



A 2.18 példa végeredményét elsőrendig sorfejtve α -ban:

$$E_{10} = \hbar\omega_1 \left(1 + \frac{1}{2}\right) = \frac{3}{2}\hbar\omega\sqrt{1 + \frac{\alpha}{2}} \approx \frac{3}{2}\hbar\omega \left(1 + \frac{\alpha}{4}\right) \Rightarrow \delta E = \frac{3}{8}\hbar\omega\alpha$$

$$E_{01} = \hbar\omega_1 \left(1 + \frac{1}{2}\right) = \frac{3}{2}\hbar\omega\sqrt{1 - \frac{\alpha}{2}} \approx \frac{3}{2}\hbar\omega \left(1 - \frac{\alpha}{4}\right) \Rightarrow \delta E = -\frac{3}{8}\hbar\omega\alpha$$

Vagyis a perturbatív eredmény és az egzakt megoldás α -ban elsőrendű sorfejtése között egy $\frac{3}{2}$ -es szorzófaktornyi különbséget találunk.

6.6 Megoldás

$$\delta E_1^{(1)} = \frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^R 4\pi r^2 V(r) \underbrace{e^{-\frac{2r}{a_0}}}_{\approx 1} \quad (6.140)$$

Itt kihasználtuk, hogy mivel $R/a_0 = 10^{-3}$, az exponenciálisan helyettesíthetjük 1-gyel. Az eltolódás a kétféle potenciál esetén:

$$\delta E_1^{(1)} = \begin{cases} \frac{2\alpha}{5a_0} \left(\frac{R}{a_0}\right)^2 & \text{az 1. esetben} \\ \frac{2\alpha}{3a_0} \left(\frac{R}{a_0}\right)^2 & \text{az 2. esetben} \end{cases} \quad (6.141)$$

$$E_1 = E_1^{(0)} + \delta E_1^{(1)} = \begin{cases} E_1^{(0)} \left(1 - \frac{4}{5} \left(\frac{R}{a_0}\right)^2\right) & \text{az 1. esetben} \\ E_1^{(0)} \left(1 - \frac{4}{3} \left(\frac{R}{a_0}\right)^2\right) & \text{a 2. esetben} \end{cases} \quad (6.142)$$

6.7 Megoldás A Yukawa potenciál sorfejtése kis árnyékolás esetén:

$$V(r) = -k \frac{e^2}{r} e^{-\alpha r} \approx -k \frac{e^2}{r} \left(1 - \alpha r + \frac{\alpha^2 r^2}{2} \right) = -k \frac{e^2}{r} + \alpha k e^2 - \frac{1}{2} k e^2 \alpha^2 r \quad (6.143)$$

Vagyis a perturbáló potenciál az utolsó két tag, ennek várható értékére van szükségünk a hidrogén n -edik sajátállapotában. Felhasználva az (5.78) egyenletet:

$$\left\langle \alpha k e^2 - \frac{1}{2} k e^2 \alpha^2 r \right\rangle_n = \alpha k e^2 - \frac{1}{2} k e^2 \alpha^2 \langle r \rangle_n = \alpha k e^2 - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{4m} (3n^2 - \ell(\ell + 1)) \quad (6.144)$$

Az energia elsőrendű kifejezése tehát:

$$E_{n,\ell}^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2 n^2} + \alpha k e^2 - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{4m} (3n^2 - \ell(\ell + 1)) \quad (6.145)$$

6.8 Megoldás

$$\delta E_n = -\frac{8}{L^3} e\mathcal{E} \int_0^L \int_0^L \int_0^L dx dy dz z \sin^2 \left(\frac{n_x \pi}{L} x \right) \sin^2 \left(\frac{n_y \pi}{L} y \right) \sin^2 \left(\frac{n_z \pi}{L} z \right) = -\frac{1}{2} e\mathcal{E} L \quad (6.146)$$

6.9 Megoldás Mivel a spin értéke 1, az \hat{S}^2 és \hat{S}_z közös sajátbázisán bevezethetjük az \hat{S}_z sajátértékeivel címkézett $| -1 \rangle$, $| 0 \rangle$ és $| 1 \rangle$ báziselemeket. Ebben a bázisban H_0 mátrixa:

$$H_0 = \begin{pmatrix} b-a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b+a \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} E_- = b-a \\ E_0 = 0 \\ E_+ = b+a \end{cases} \quad (6.147)$$

A perturbáció mátrixa:

$$W = \omega \mathbf{S} \mathbf{n} = \omega \begin{pmatrix} -\cos \vartheta & \frac{\sqrt{2}}{2} \sin \vartheta e^{i\varphi} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \sin \vartheta e^{-i\varphi} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \sin \vartheta e^{i\varphi} & \cos \vartheta \end{pmatrix} \quad (6.148)$$

Vizsgáljuk meg a és b három értékét:

- $a \neq b \neq 0$: $\tilde{E}_- = E_- - \omega \cos \vartheta$, $\tilde{E}_0 = E_0$, $\tilde{E}_+ = E_+ + \omega \cos \vartheta$
- $a = 0$, $b \neq 0$:
Ekkor $E_+ = E_- \neq E_0$, vagyis ez az altér kétszeresen degenerált. Emiatt a

$$\tilde{W} = \omega \begin{pmatrix} -\cos \vartheta & 0 \\ 0 & \cos \vartheta \end{pmatrix} \quad (6.149)$$

mátrix sajátértékeit kell megkeresnünk, így a következőre jutunk: $\tilde{E}_- = E_- - \omega \cos \vartheta = b - \omega \cos \vartheta$, $\tilde{E}_0 = E_0$, $\tilde{E}_+ = E_+ + \omega \cos \vartheta = b + \omega \cos \vartheta$

- $a = b \neq 0$ Ekkor $E_- = E_0 \neq E_+$, és $E_+ = 2a$, vagyis ez az altér is kétszeresen degenerált. Emiatt a

$$\tilde{W} = \omega \begin{pmatrix} -\cos \vartheta & \frac{\sqrt{2}}{2} \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \sin \vartheta e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \quad (6.150)$$

mátrix sajátértékeit kell megkeresnünk, így a következőre jutunk: $\tilde{E}_- = -\frac{\omega}{2} (\cos \vartheta - \sqrt{2 - \cos^2 \vartheta})$,
 $\tilde{E}_0 = -\frac{\omega}{2} (\cos \vartheta + \sqrt{2 - \cos^2 \vartheta})$, $\tilde{E}_+ = 2a$

6.10 Megoldás Szimmetrikus mértékben, azaz $A = (-\frac{B}{2}y, \frac{B}{2}x, 0)$ esetén,

$$H = \frac{1}{2m} \left((p_x + \frac{1}{2}qBy)^2 + (p_y - \frac{1}{2}qBx)^2 + p_z^2 \right) - \frac{\alpha}{r} - 2\mu_B S_z B \quad (6.151)$$

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - \frac{\alpha}{r} - \mu_B L_z B - 2\mu_B S_z B - \frac{q^2 B^2}{8m^2} (x^2 + y^2) \quad (6.152)$$

A perturbáló operátor:

$$W = -\mu_B L_z B - \mu_B S_z B - \frac{q^2 B^2}{8m^2} \underbrace{(x^2 + y^2)}_{r^2 \sin^2(\vartheta)} \quad (6.153)$$

Az első rendű energiakorrekció alapállapotban $E^{(1)} = \langle 100|W|100 \rangle$:

$$\delta E^{(1)} = \underbrace{-\mu_B B \langle L_z \rangle}_0 - 2\mu_B B \langle S_z \rangle - \frac{q^2 B^2}{8m^2} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi}_0 \int_0^\infty \frac{4}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} r^4 dr \int_{-\pi}^\pi \sin^2 \vartheta \underbrace{(Y_0^0)^2}_{\frac{1}{4\pi}} \sin \vartheta d\vartheta = \quad (6.154)$$

$$\pm \hbar \mu_B B - \frac{q^2 B^2}{8m^2} 2\pi \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty r^4 e^{-\frac{2r}{a_0}} dr \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^\pi (1 - \cos^2 \vartheta) d \cos \vartheta \quad (6.155)$$

$$\delta E^{(1)} = \pm \hbar \mu_B B - \frac{q^2 B^2 a_0^2}{4m^2} \quad (6.156)$$

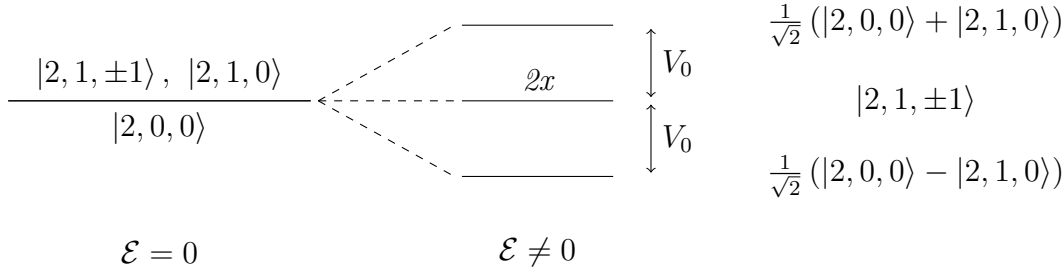
6.11 Megoldás A z irányú elektromos teret leíró perturbáló potenciál a következő alakú:

$$V = -(-e)\mathcal{E}z = e\mathcal{E}z = e\mathcal{E}r \cos \vartheta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} e\mathcal{E}r Y_1^0(\vartheta, \varphi) \quad (6.157)$$

Az E_{nlm} energiaszint $n = 2$ -re 4-szeresen elfajult ($l = 0, m = 0$; $l = 1, m = -1, 0, 1$). Megmutatható, hogy $\langle n'l'm' | z | nlm \rangle \neq 0$, ha $n' = n, l' = l + 1, m' = m$. Emiatt bevezetve a $V_0 = -3a_0 e\mathcal{E}$ jelölést a $(|200\rangle, |210\rangle, |21-1\rangle, |211\rangle)$ bázison kifejtve a perturbáció mátrixa:

$$V = \begin{pmatrix} 0 & V_0 & 0 & 0 \\ V_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \tilde{E}_{2lm} = 0, 0, \pm V_0 \quad (6.158)$$

Vagyis a 4-szeres degeneráció felhasad egy kétszeresen degenerált, és két nem degenerált nívóra:



6.12 Megoldás Az $x-y$ síkban fekvő oszcillátor esetén a merőleges tér z irányú. Ekkor a szimmetrikus mérték szerint $A = (-\frac{B}{2}y, \frac{B}{2}x, 0)$. Így a Hamilton-operátor alakja:

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_x + \frac{eB}{2}y \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(p_y - \frac{eB}{2}x \right)^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2 (x^2 + y^2) = \quad (6.159)$$

$$\underbrace{\frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}m\omega_0^2 (x^2 + y^2)}_{H_0} + \underbrace{\hbar\omega_c \frac{p_x y - p_y x}{\hbar} + \frac{1}{2}m \left(\frac{\omega_c}{2} \right)^2 (x^2 + y^2)}_V \quad (6.160)$$

Itt bevezettük az $\omega_c = \frac{e}{m}B$ jelölést. Perturbatíván kezelve a V -t szükségünk van a V alapállapotú várható értékére az $E_0^{(0)} = \hbar\omega_0$ alapállapotú energia eltolódásának kiszámításához:

$$\delta E_0^{(1)} = \langle 0 | V | 0 \rangle = \omega_c \underbrace{\langle 0 | L_z | 0 \rangle}_0 + \underbrace{\langle 0 | \frac{1}{2}m\omega_0^2 r^2 | 0 \rangle}_{\frac{1}{2}E_0^{(0)} = \frac{\hbar\omega_0}{2}} \left(\frac{\omega_c}{2\omega_0} \right)^2 = \frac{\hbar e^2}{8m^2\omega_0} B^2 \quad (6.161)$$

Innen a mágneses szuszceptibilitás:

$$\chi = -\frac{\partial^2 E_0^{(1)}}{\partial B^2} = -\frac{\hbar e^2}{4m^2\omega_0} \quad (6.162)$$

Az alapállapotú energiát azonban ki tudjuk számolni egzaktul is:

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + \omega_c L_z + \frac{1}{2}m \left(\omega_0^2 + \left(\frac{\omega_c}{2} \right)^2 \right) (x^2 + y^2) \quad (6.163)$$

Mivel $\langle 0 | L_z | 0 \rangle = 0$,

$$E_0 = \hbar \sqrt{\omega_0^2 + \left(\frac{\omega_c}{2} \right)^2} = \hbar\omega_0 \sqrt{1 + \left(\frac{\omega_c}{2\omega_0} \right)^2} \quad (6.164)$$

Innen tehát

$$\chi = -\frac{\partial^2 E_0}{\partial B^2} \Big|_{B=0} = -\hbar\omega_0 \frac{1}{4\omega_0^2 \left(1 + \left(\frac{\omega_c}{2\omega_0} \right)^2 \right)^{\frac{3}{2}}} \frac{e^2}{m^2} \Big|_{B=0} = -\frac{\hbar e^2}{4m^2\omega_0} \quad (6.165)$$

Ami megegyezik a perturbációs számítással kapott eredménnyel. Ha a nem-perturbatív energiakifejezést első rendig sorba fejtjük B szerint, akkor épp a perturbatív eredményt kapjuk. Vagyis perturbatív kifejezés olyan mágneses terek esetén is jó, amikor $\omega_c \ll \omega_0$, tehát $B \ll \frac{m\omega_0}{e}$.

6.13 Megoldás

$$H_0 = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 \\ 0 & -\varepsilon \end{pmatrix} \quad V = \begin{pmatrix} 0 & J \\ J & 0 \end{pmatrix} \quad (6.166)$$

Világos, hogy H_0 sajátértékei $E_{\pm} = \pm\varepsilon$, sajátvektorai pedig az $(1, 0)$ és a $(0, 1)$. Mindkét állapotban $\langle V \rangle = 0$, hiszen V diagonális elemei nullák. Így az első nem eltűnő korrekció másodrendű, mellyel $\tilde{E}_{\pm} = \pm\varepsilon \pm \frac{J^2}{2\varepsilon}$. Egyszerűen megadhatjuk azonban az egzakt megoldást, ehhez csak a $H_0 + V$ sajátértékeit kell meghatároznunk, amik $\tilde{\tilde{E}}_{\pm} = \pm\sqrt{\varepsilon^2 + J^2} = \pm\varepsilon\sqrt{1 + \left(\frac{J}{\varepsilon}\right)^2}$. Ezt kis J esetén első rendig sorba fejtvé épp a perturbációs számítás eredményét kapjuk.

6.14 Megoldás

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2\Theta} \frac{d^2}{d\varphi^2} \Rightarrow E_m^{(0)} = \frac{\hbar^2 m^2}{2\Theta}, \quad \psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (6.167)$$

$$\begin{aligned} V_{m,m'} &= -\frac{P\mathcal{E}}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi} \cos \varphi d\varphi = \\ &= -\frac{P\mathcal{E}}{4\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m'-m+1)\varphi} + e^{i(m'-m-1)\varphi} d\varphi = \begin{cases} -\frac{P\mathcal{E}}{2}, & \text{ha } m' = m \pm 1 \\ 0, & \text{egyébként} \end{cases} \end{aligned}$$

Azaz $E_m^{(1)} = V_{mm} = 0$, vagyis első rendben nem kapunk korrekciót a másod rend a következőt adja:

$$E_m^{(2)} = \frac{|V_{m,m-1}|^2}{E_m^{(0)} - E_{m-1}^{(0)}} + \frac{|V_{m,m+1}|^2}{E_m^{(0)} - E_{m+1}^{(0)}} = \frac{\Theta (P\mathcal{E})^2}{\hbar^2(4m^2 - 1)} \quad (6.168)$$

Vagyis $E_0^{(2)} = -\frac{\Theta(P\mathcal{E})^2}{\hbar^2}$, $E_1^{(2)} = \frac{\Theta(P\mathcal{E})^2}{3\hbar^2}$, $E_2^{(2)} = \frac{\Theta(P\mathcal{E})^2}{15\hbar^2}$, ...

6.15 Megoldás

$$H_0 = \frac{L^2}{2\Theta} \Rightarrow E_{\ell,m}^{(0)} = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\Theta}, \quad \psi_{\ell,m} = Y_{\ell}^m(\vartheta, \varphi) \quad (\ell = 0, 1, \dots; m = -\ell \dots \ell) \quad (6.169)$$

$$V = -P\mathcal{E} = -P\mathcal{E} \cos \vartheta = -\sqrt{\frac{4\pi}{3}} P\mathcal{E} Y_1^0 \quad (6.170)$$

A $\langle \ell', m' | V | \ell, m \rangle$ mátrixelem meghatározásához használjuk a

$$\cos \vartheta Y_{\ell}^m = \left(\frac{(\ell+1+m)(\ell+1-m)}{(2\ell+1)(2\ell+3)} \right)^{\frac{1}{2}} Y_{\ell+1}^m + \left(\frac{(\ell+m)(\ell-m)}{(2\ell+1)(2\ell-1)} \right)^{\frac{1}{2}} Y_{\ell-1}^m \quad (6.171)$$

összefüggést. Ebből világos, hogy $E_{\ell,m}^{(1)} = \langle \ell, m | V | \ell, m \rangle = 0$, tehát másodrendig kell elmenünk. Az is világos, hogy $\langle \ell', m' | V | \ell, m \rangle \neq 0$, ha $\ell' = \ell \pm 1$ és $m' = m$. Így a másodrendű képlet szummája 2 taggá egyszerűsödik:

$$E_{\ell,m}^{(2)} = \frac{|\langle \ell+1, m | V | \ell, m \rangle|^2}{E_{\ell,m}^0 - E_{\ell+1,m}^0} + \frac{|\langle \ell-1, m | V | \ell, m \rangle|^2}{E_{\ell,m}^0 - E_{\ell-1,m}^0} = \frac{(P\mathcal{E})^2}{E_{\ell,m}^0} \frac{\ell(\ell+1) - 3m^2}{2(2\ell-1)(2\ell+3)}, \quad \text{ha } \ell \geq 1 \quad (6.172)$$

Az $\ell = 0$ esetben

$$E_{0,m}^{(2)} = \frac{|\langle 1, 0 | V | 0, 0 \rangle|^2}{0 - \frac{\hbar^2}{\Theta}} = -\frac{\hbar^2}{\Theta} |\langle 1, 0 | V | 0, 0 \rangle|^2 = -\frac{\Theta (P\mathcal{E})^2}{3\hbar^2} \quad (6.173)$$

6.16 Megoldás A perturbálatlan Hamilton-operátor illetve a perturbáló elektromos potenciál alakja::

$$H_0 = \hbar\omega_0 \left(a_x^+ a_x + a_y^+ a_y + a_z^+ a_z + \frac{3}{2} \right) \quad W = e\mathcal{E}z = e\mathcal{E} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} (a_z^+ + a_z) \quad (6.174)$$

Világos, hogy az elsőrendű energiakorrekció zérus:

$$\langle n_x n_y n_z | W | n_x n_y n_z \rangle = e\mathcal{E} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \langle n_x n_y n_z | a_z^+ + a_z | n_x n_y n_z \rangle = 0 \quad (6.175)$$

Az alapállapot hullámfüggvény elsőrendű korrekciója:

$$|\Psi_0^{(1)}\rangle = - \sum_{n_x, n_y, n_z} \frac{\langle n_x n_y n_z | W | 000 \rangle}{E_{n_x n_y n_z} - E_0} |n_x n_y n_z\rangle \quad (6.176)$$

A $|\Psi_0^{(0)}\rangle = |000\rangle$ alapállapot hullámfüggvényt közelíthetjük a $|\tilde{\Psi}\rangle = |\Psi_0^{(0)}\rangle + |\Psi_0^{(1)}\rangle$ összeggel ($|\Psi_0^{(0)}\rangle$ merőleges $|\Psi_0^{(1)}\rangle$ -re), ahol $\langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} \rangle = 1 + \mathcal{O}(\mathcal{E}^2)$ normanégyzet 1-től való eltérése \mathcal{E} -ben csak másodrendű, így elhagyható az elsőrendű számolásakor. A P dipólusmomentum kifejezése:

$$P = e \langle \tilde{\Psi} | z | \tilde{\Psi} \rangle = e \left(\langle \Psi_0^{(0)} | z | \Psi_0^{(1)} \rangle + \langle \Psi_0^{(1)} | z | \Psi_0^{(0)} \rangle \right) = 2e\Re \left(\langle \Psi_0^{(0)} | z | \Psi_0^{(1)} \rangle \right) \quad (6.177)$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0^{(0)} | z | \Psi_0^{(1)} \rangle &= - \langle 000 | z \sum_{n_x, n_y, n_z} \frac{\langle n_x n_y n_z | e\mathcal{E}z | 000 \rangle}{(n_x + n_y + n_z)\hbar\omega_0} |n_x n_y n_z\rangle = \\ &= -e\mathcal{E} \sum_{n_x, n_y, n_z} \frac{\langle n_x n_y n_z | z | 000 \rangle \langle 000 | z | n_x n_y n_z \rangle}{(n_x + n_y + n_z)\hbar\omega_0} = \\ &= -e\mathcal{E} \frac{|\langle 000 | z | 001 \rangle|^2}{(0+0+1)\hbar\omega_0} = \frac{e\mathcal{E}}{\hbar\omega_0} \frac{\hbar}{2m\omega_0} = \frac{e\mathcal{E}}{2m\omega_0^2} \end{aligned}$$

Tehát a polarizáció illetve az elektromos szuszceptibilitás:

$$P = -e \langle \tilde{\Psi} | z | \tilde{\Psi} \rangle = \frac{e^2 \mathcal{E}}{2m\omega_0^2} \quad \chi\mathcal{E} = -\frac{e^2}{2m\omega_0^2} \quad (6.178)$$

6.17 Megoldás Keressük meg az $H_1 = \xi \mathbf{L} \mathbf{S} = \xi (L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z)$ operátor mátrixát az $\ell = 1$ -hez tartozó altér következő bázisán: $|1, \uparrow\rangle, |1, \downarrow\rangle, |0, \uparrow\rangle, |0, \downarrow\rangle, |-1, \uparrow\rangle, |-1, \downarrow\rangle$! Használjuk fel ehhez a következő $\ell = 1$ és $s = 1/2$ esetén érvényes összefüggéseket:

$$S_x |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle, \quad S_x |\downarrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle, \quad S_y |\uparrow\rangle = i\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle, \quad S_y |\downarrow\rangle = -i\frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle, \quad S_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle, \quad S_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle \quad (6.179)$$

$$L_z |m\rangle = \hbar m |m\rangle, \quad L_{\pm} |m\rangle = \hbar \sqrt{2 - m(m \pm 1)} |m \pm 1\rangle \quad (6.180)$$

Mivel S_x és S_y a spinen forgat, az azonos spinekhez tartozó mátrixelemekben csak $L_z S_z$ szerepel:

$$\langle m \uparrow | \mathbf{L S} | m' \uparrow \rangle = \langle m \uparrow | \xi L_z S_z | m' \uparrow \rangle = \xi \langle m | L_z | m' \rangle \langle \uparrow | S_z | \uparrow \rangle = \frac{\hbar^2}{2} m' \xi \delta_{m,m'} \quad (6.181)$$

$$\langle m \downarrow | \xi \mathbf{L S} | m' \downarrow \rangle = -\frac{\hbar^2}{2} m' \xi \delta_{m,m'} \quad (6.182)$$

A különböző spinekhez tartozó mátrixelemekben pedig az $L_z S_z$ nem szerepel:

$$\begin{aligned} \langle m \uparrow | \xi \mathbf{L S} | m' \downarrow \rangle &= \xi \langle m \uparrow | L_x S_x + L_y S_y | m' \downarrow \rangle = \xi \langle m | \frac{\hbar}{2} L_x - i \frac{\hbar}{2} L_y | m' \rangle = \\ &= \xi \frac{\hbar}{2} \langle m | L_- | m' \rangle = \xi \frac{\hbar^2}{2} \sqrt{2 - m'(m' - 1)} \delta_{m,m'-1} \end{aligned}$$

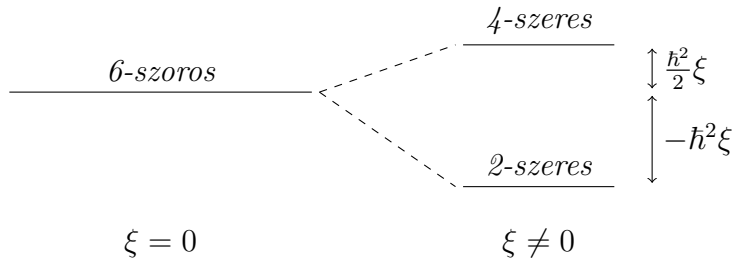
$$\langle m \downarrow | \xi \mathbf{L S} | m' \uparrow \rangle = \xi \frac{\hbar^2}{2} \sqrt{2 - m'(m' + 1)} \delta_{m,m'+1}$$

Tehát a $H_1 = \xi \mathbf{L S}$ operátor mátrixa:

$$\xi \mathbf{L S} = \xi \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.183)$$

A mátrix blokkdiagonális, így elég csak a 4 diagonális blokkot külön diagonalizálnunk. Ezalapján a sajátértékek és a hozzájuk tartozó sajátfüggvények:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2} \xi : & |1, \uparrow\rangle & \frac{\hbar^2}{2} \xi : & \sqrt{\frac{2}{3}} |0, \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |-1, \uparrow\rangle \\ \frac{\hbar^2}{2} \xi : & \sqrt{\frac{2}{3}} |0, \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |1, \downarrow\rangle & -\hbar^2 \xi : & \frac{1}{\sqrt{3}} |0, \downarrow\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |-1, \uparrow\rangle \\ -\hbar^2 \xi : & \frac{1}{\sqrt{3}} |0, \uparrow\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |1, \downarrow\rangle & \frac{\hbar^2}{2} \xi : & |-1, \downarrow\rangle \end{aligned} \quad (6.184)$$



6.18 Megoldás Időfüggő perturbációszámítás első rendjében az átmeneti valószínűség:

$$P_{i \rightarrow f}^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t \langle f | V(t') | i \rangle e^{\frac{i}{\hbar} (E_f^{(0)} - E_i^{(0)}) t'} dt' \right|^2 \quad (6.185)$$

Itt $V(t) = -e\mathcal{E}_0 z e^{-\frac{t}{\tau}}$, $|f\rangle = \psi_{2,\ell,m}$ és $|i\rangle = \psi_{1,0,0}$, tehát (bevezetve az $\omega_{fi} = (E_f^{(0)} - E_i^{(0)})/\hbar$ jelölést)

$$P_{i \rightarrow f}^{(1)}(t) = \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2}{\hbar^2} \underbrace{\left| \langle \psi_{2,\ell,m} | z | \psi_{1,0,0} \rangle \right|}_{z_{fi}}^2 \underbrace{\left| \int_0^t e^{-\frac{t-t'}{\tau}} e^{i\omega_{fi}t'} dt' \right|}_{g(t)}^2 \quad (6.186)$$

Számítsuk ki először z_{fi} -t:

$$\psi_{1,0,0}(\mathbf{r}) = 2 \left(\frac{z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{z}{a_0}} Y_0^0(\hat{r}) \quad \psi_{2,\ell,m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} R_{2,\ell}(r) Y_\ell^m(\hat{r}) \quad (6.187)$$

$$Y_1^0(\hat{r}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \Rightarrow z = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_1^0(\hat{r}) \quad (6.188)$$

A szög szerinti integrálás a következőt adja:

$$\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int Y_\ell^m(\hat{r}) Y_1^0(\hat{r}) Y_0^0(\hat{r}) d\Omega = \frac{1}{\sqrt{3}} \int Y_\ell^m(\hat{r}) Y_1^0(\hat{r}) d\Omega = \frac{1}{\sqrt{3}} \delta_{\ell,1} \delta_{m,0} \quad (6.189)$$

Emiatt a radiális rész integrálásánál csak az $R_{2,1}(r) = \frac{2r}{\sqrt{3}} \left(\frac{z}{2a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{zr}{2a_0} e^{-\frac{zr}{2a_0}}$ esettel kell törődnünk:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{2,1,0} | z | \psi_{1,0,0} \rangle &= \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{z}{2a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{z}{2a_0} \frac{1}{\sqrt{3}} 2 \left(\frac{z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \underbrace{\int_0^\infty dr r^4 e^{-\frac{zr}{a_0}} e^{-\frac{zr}{2a_0}}}_{\left(\frac{2a_0}{3z} \right)^5 \int_0^\infty dx x^4 e^{-x}} \\ &= \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{z}{2a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{z}{2a_0} \frac{1}{\sqrt{3}} 2 \left(\frac{z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{2a_0}{3z} \right)^5 24 = \frac{a_0}{z} \frac{2^8}{\sqrt{2}} \frac{1}{3^5} \end{aligned}$$

Már csak az időfüggő $g(t)$ tag számolása van hátra:

$$\begin{aligned} g(t) &= \left| \int_0^t e^{-(\frac{1}{\tau} - i\omega_{fi})t'} dt' \right|^2 = \left| -\frac{1}{\frac{1}{\tau} - i\omega_{fi}} \left(1 - e^{-(\frac{1}{\tau} - i\omega_{fi})t} \right) \right|^2 = \\ &= \frac{\tau^2}{1 + \omega_{fi}^2 \tau^2} \left(1 + e^{-2\frac{t}{\tau}} - 2e^{-\frac{t}{\tau}} \cos \omega_{fi} t \right) \\ \lim_{t \rightarrow \infty} g(t) &= \frac{\tau^2}{1 + \omega_{fi}^2 \tau^2} \end{aligned}$$

Tehát

$$P_{2\ell m \rightarrow 100}(t \rightarrow \infty) = \delta_{\ell,1} \delta_{m,0} 0.555 \left(\frac{ea_0}{z\hbar} \right)^2 \mathcal{E}_0^2 \frac{\tau^2}{1 + \omega_{fi}^2 \tau^2} = \frac{1}{\hbar^2} |V_{fi}|^2 \frac{\tau^2}{1 + \omega_{fi}^2 \tau^2} \quad (6.190)$$

Ha vesszük a $\tau \rightarrow \infty$ határesetet, akkor az egy $V(t) = -e\mathcal{E}_0 z \Theta(t)$, lépcsőszerűen bekapcsolt perturbációnak felel meg, ami

$$P_{fi}(t \rightarrow \infty) = \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \quad (6.191)$$

eredményt ad. Mivel a perturbáció $t > 0$ -ra időfüggetlen, érdekes lehet az időfüggetlen perturbációs számítás eredménye is, mely másodrendben a

$$P_{fi} = |c_{if}|^2 = \left| \frac{\langle \psi_i^{(0)} | V | \psi_f^{(0)} \rangle}{E_f^{(0)} - E_i^{(0)}} \right|^2 \quad (6.192)$$

eredményre vezet, mely láthatóan egyezik az időfüggő perturbáció limeszeként kapott eredménnyel. Ha azonban a Fermi-féle arany szabályból szeretnénk számolni, akkor

$$P_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f^{(0)} - E_i^{(0)}) t \quad (6.193)$$

az eredmény, ami $t \rightarrow \infty$ limeszben divergál, így rossz eredmény.

6.19 Megoldás Az oszcillátorra ható perturbáló potenciál $V(t) = -ex\mathcal{E}(t)$ alakú. A perturbációs számítás első rendjében:

$$P_{0 \rightarrow 1} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \langle 0 | V(t) | 1 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 - E_1)t} dt \right|^2 \quad (6.194)$$

A V_{01} mátrixelem számolásakor a tér- és időfüggő részek szétválaszthatóak, így a térszerű rész kivihető az időintegrál elé. Így a következőket kell kiszámolnunk (felhasználva, hogy $\hbar\omega = E_0 - E_1$, és bevezetve $y = t/\tau - t$):

$$-e\mathcal{E}_0 \langle 0 | x | 1 \rangle = -e\mathcal{E}_0 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \quad (6.195)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^2} e^{-i\omega t} dt &= \frac{\tau}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} e^{-i\omega\tau y} dy = \\ &= \frac{\tau}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(y+i\frac{\omega\tau}{2})^2} dy e^{-\left(\frac{\omega\tau}{2}\right)^2} = \\ &= \tau e^{-\left(\frac{\omega\tau}{2}\right)^2} \end{aligned}$$

Ezeket felhasználva:

$$P_{0 \rightarrow 1} = \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2 \tau^2}{2m\hbar\omega} e^{-\frac{\omega^2 \tau^2}{2}}. \quad (6.196)$$

6.20 Megoldás *A perturbáló potenciál:*

$$V(t) = -qx\mathcal{E}_0, \text{ ha } 0 \leq t \leq t_0 \quad (6.197)$$

Az átmeneti valószínűség valamelyik n -edik gerjesztett állapotba:

$$P(0 \rightarrow n) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^{t_0} \langle n | V(t') | 0 \rangle e^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)} - E_0^{(0)})t'} dt' \right|^2 \quad (6.198)$$

Az integrálban szereplő mátrixelem:

$$\langle n | V(t') | 0 \rangle = -q\mathcal{E}_0 \langle n | x | 0 \rangle = -q\mathcal{E}_0 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \langle n | a + a^\dagger | 0 \rangle = -q\mathcal{E}_0 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \delta_{n,1} \quad (6.199)$$

Azaz $P(0 \rightarrow n) = 0$, ha $n \neq 1$.

$$P(0 \rightarrow 1) = \frac{q^2 \mathcal{E}_0^2 \hbar}{2m\omega_0 \hbar^2} \left| \int_0^{t_0} e^{i\omega_0 t'} dt' \right|^2 = \frac{q^2 \mathcal{E}_0^2 \hbar}{2m\omega_0 \hbar^2} 4 \frac{\sin^2(\omega_0 t_0)}{\omega_0^2} = \frac{2q^2 \mathcal{E}_0^2}{m\omega_0^3 \hbar} \sin^2(\omega_0 t_0) \quad (6.200)$$

6.21 Megoldás

$$P(1 \rightarrow n) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\tau \langle n | V(t') | 1 \rangle e^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)} - E_1^{(0)})t'} dt' \right|^2 \quad (6.201)$$

Az integrálban szereplő mátrixelem:

$$\langle n | V(t') | 1 \rangle = -(-e)\mathcal{E}_0 \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) x \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) dx = e\mathcal{E}_0 \frac{4Ln(1 + (-1)^n)}{\pi^2(n^2 - 1)^2} \quad (6.202)$$

Az időintegrál:

$$\left| \int_0^\tau e^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)} - E_1^{(0)})t'} dt' \right|^2 = \frac{4m^2 L^4}{\hbar^2 \pi^2 (n^2 - 1)^2} [1 - \cos(\omega_n \tau)], \quad \text{ahol } \omega_n = \frac{\hbar \pi^2}{2mL^2} (n^2 - 1) \quad (6.203)$$

Tehát

$$P(1 \rightarrow n) = \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2 m^2 L^6}{\hbar^4 \pi^6} \frac{128n^2(1 + (-1)^n)}{(n^2 - 1)^6} \left[1 - \cos\left(\frac{\hbar \pi^2}{2mL^2} (n^2 - 1)\tau\right) \right], \quad (6.204)$$

azaz $P(1 \rightarrow n) = 0$, ha n páratlan.

6.22 Megoldás *Legyen az oszcillátor kezdetben az n -edik gerjesztett állapotban. A $|\psi(t)\rangle$ állapot elsőrendű közelítéséhez szükségünk van a lehetséges átmeneti rátákra, melyek csak*

önmagukba, illetve a szomszédos állapotokba nem nullák első rendben:

$$c_{n,n}^{(1)}(t) = 1 \quad (6.205)$$

$$c_{n,n+1}^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sqrt{n+1} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} e\mathcal{E} \int_{-\infty}^t F(t') e^{i\omega_0 t'} dt' \quad (6.206)$$

$$c_{n,n-1}^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sqrt{n} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} e\mathcal{E} \int_{-\infty}^t F(t') e^{-i\omega_0 t'} dt' \quad (6.207)$$

Itt bevezettük az

$$F(t) = \begin{cases} e^{\alpha t} \sin \omega t & , \text{ ha } t < 0 \\ \sin \omega t & , \text{ ha } t > 0 \end{cases} \quad (6.208)$$

jelölést. Világos, hogy az átmeneti ráták számolásához időfüggő részben szereplő alábbi integrálokat kell kiszámolnunk:

$$\int_{-\infty}^t F(t') e^{\pm i\omega_0 t'} dt' = \int_{-\infty}^0 e^{(\alpha \pm i\omega_0)t'} \sin \omega t' dt' + \int_0^t e^{\pm i\omega_0 t'} \sin \omega t' dt' \quad (6.209)$$

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_{-\infty}^0 e^{(\alpha \pm i\omega_0)t'} \sin \omega t' dt' = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{2i} \left(\frac{1}{\alpha + i\omega \pm i\omega_0} - \frac{1}{\alpha - i\omega \pm i\omega_0} \right) = -\frac{\omega}{\omega^2 - \omega_0^2} \quad (6.210)$$

$$\int_0^t e^{\pm i\omega_0 t'} \sin \omega t' dt' = -\frac{1}{2} \frac{e^{i(\omega \pm \omega_0)t}}{\omega \pm \omega_0} - \frac{1}{2} \frac{e^{-i(\omega \mp \omega_0)t}}{\omega \mp \omega_0} + \underbrace{\frac{1}{2} \frac{1}{\omega \pm \omega_0} + \frac{1}{2} \frac{1}{\omega \mp \omega_0}}_{\frac{\omega}{\omega^2 - \omega_0^2}} \quad (6.211)$$

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_{-\infty}^t F(t') e^{\pm i\omega_0 t'} dt' = -\frac{1}{2} \frac{e^{i(\omega \pm \omega_0)t}}{\omega \pm \omega_0} - \frac{1}{2} \frac{e^{-i(\omega \mp \omega_0)t}}{\omega \mp \omega_0} \quad (6.212)$$

Ennek felhasználásával az $\alpha \rightarrow 0$ limeszben

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-i\omega_0(n+\frac{1}{2})t} |n\rangle + e^{-i\omega_0(n+\frac{3}{2})t} c_{n,n+1}^{(1)}(t) |n+1\rangle + e^{-i\omega_0(n-\frac{1}{2})t} c_{n,n-1}^{(1)}(t) |n-1\rangle = \\ &= e^{-i\omega_0(n+\frac{1}{2})t} \left(|n\rangle + c_{n,n+1}^{(1)}(t) e^{-i\omega_0 t} |n+1\rangle + c_{n,n-1}^{(1)}(t) e^{i\omega_0 t} |n-1\rangle \right) \end{aligned}$$

Vezessük be a következő segédmennyiségeket:

$$\tilde{c}_{n,n+1}^{(1)}(t) = c_{n,n+1}^{(1)}(t) e^{-i\omega_0 t} = \frac{e\mathcal{E}}{\hbar} \sqrt{\frac{(n+1)\hbar}{2m\omega_0}} \frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2} (i\omega \cos \omega t + \omega_0 \sin \omega t) \quad (6.213)$$

$$\tilde{c}_{n,n-1}^{(1)}(t) = c_{n,n-1}^{(1)}(t) e^{i\omega_0 t} = \frac{e\mathcal{E}}{\hbar} \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega_0}} \frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2} (i\omega \cos \omega t - \omega_0 \sin \omega t) \quad (6.214)$$

A $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1 + \left| \tilde{c}_{n,n-1}^{(1)}(t) \right|^2 + \left| \tilde{c}_{n,n+1}^{(1)}(t) \right|^2 \neq 1$, a korrekció azonban \mathcal{E} -ben másodrendű, így a polarizációra azt kapjuk első rendben, hogy:

$$P(t) = \langle \psi^{(1)}(t) | ex | \psi^{(1)}(t) \rangle = \quad (6.215)$$

$$\tilde{c}_{n,n+1}^{(1)}(t) \langle n | ex | n+1 \rangle + \tilde{c}_{n,n+1}^{(1)*}(t) \langle n+1 | ex | n \rangle + \quad (6.216)$$

$$+ \tilde{c}_{n,n-1}^{(1)}(t) \langle n | ex | n-1 \rangle + \tilde{c}_{n,n-1}^{(1)*}(t) \langle n-1 | ex | n \rangle = \quad (6.217)$$

$$2e\Re\tilde{c}_{n,n+1}^{(1)}(t)\sqrt{\frac{(n+1)\hbar}{2m\omega_0}} + 2e\Re\tilde{c}_{n,n-1}^{(1)}(t)\sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega_0}} = \frac{e^2\mathcal{E}}{m} \frac{\sin\omega t}{\omega^2 - \omega_0^2} \quad (6.218)$$

Vagyis $P(t)$ szinuszosan függ az időtől, így $P(\omega)$ épp a szinuszos tagot megelőző függvény, így a dinamikus szuszceptibilitás

$$\chi_{\mathcal{E}}(\omega) = \frac{e^2}{m} \frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2} \quad (6.219)$$

Vegyük észre, hogy az eredmény független n -től, vagyis az összes gerjesztett állapot ugyanannyira polarizálható! Az $\omega \rightarrow 0$ limeszben az eredmény megegyezik a 6.16 megoldásban található időfüggetlen eset eredményével.

6.23 Megoldás A perturbáló potenciál alakja:

$$V(t) = \begin{cases} -e\mathcal{E}_0 x e^{-\alpha t} \sin\omega t, & \text{ha } t \geq 0 \\ 0, & \text{ha } t < 0. \end{cases} \quad (6.220)$$

Innen az átmeneti valószínűségek:

$$P_{n \rightarrow m}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' \mathcal{E}_0 e^{-\alpha t'} \langle m | x | n \rangle e^{-\alpha t'} \sin\omega t' e^{i\frac{E_m - E_n}{\hbar} t'} \right|^2 \quad (6.221)$$

Mivel

$$\langle m | x | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \quad (6.222)$$

csak $P_{n \rightarrow n+1}$ és $P_{n \rightarrow n-1}$ nem nulla első rendben. Ezen valószínűségek alakja $t \rightarrow \infty$ -ben:

$$\begin{aligned} P_{n \rightarrow n+1}(t) &= \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2}{2m\hbar\omega} (n+1) \left| \int_0^\infty dt' e^{-\alpha t'} \sin\omega t' e^{i\omega_0 t'} \right|^2 = \\ &= \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2}{2m\hbar\omega} (n+1) \left| \frac{1}{2i} \int_0^\infty dt' e^{(-\alpha+i(\omega_0+\omega))t'} - e^{(-\alpha+i(\omega_0-\omega))t'} \right|^2 = \\ &= \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2}{2m\hbar\omega} (n+1) \left| \frac{1}{2i} \left(\frac{1}{\alpha - i(\omega_0 + \omega)} - \frac{1}{\alpha - i(\omega_0 - \omega)} \right) \right|^2 = \\ &= \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2}{2m\hbar\omega} (n+1) \left| \frac{\omega}{\alpha^2 + \omega^2 - \omega_0^2 - 2i\alpha\omega_0} \right|^2 = \\ &= \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2}{2m\hbar\omega} (n+1) \frac{\omega^2}{(\alpha^2 + \omega^2 - \omega_0^2)^2 + 4\alpha^2\omega_0^2} \\ P_{n \rightarrow n-1}(t) &= \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2}{2m\hbar\omega} n \frac{\omega^2}{(\alpha^2 + \omega^2 - \omega_0^2)^2 + 4\alpha^2\omega_0^2} \end{aligned}$$

Ekkor véve az $\alpha \rightarrow 0$ határesetet:

$$P_{n \rightarrow n+1}(t) = \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2}{2m\hbar\omega} (n+1) \frac{\omega^2}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2}$$
$$P_{n \rightarrow n-1}(t) = \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2}{2m\hbar\omega} n \frac{\omega^2}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2}$$

Vegyük észre, hogy a $t \rightarrow \infty$ és $\alpha \rightarrow 0$ limeszt nem cserélhetjük fel!

7. fejezet

Szóráselmélet

7.1. Elmélet

7.1.1. Kontinuitási egyenlet, valószínűségi áramsűrűség

Az időfüggő Schrödinger-egyenletet,

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}, t) \right) \psi(\mathbf{r}, t) , \quad (7.1)$$

ψ^* -gal beszorozva, ill. a konjugált egyenletet,

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}, t) \right) \psi^*(\mathbf{r}, t) , \quad (7.2)$$

ψ -vel beszorozva, majd a két egyenletet egymásból kivonva az

$$i\hbar \left(\psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) \right) = \frac{\hbar^2}{2m} (\psi(\mathbf{r}, t) \Delta \psi^*(\mathbf{r}, t) - \psi^*(\mathbf{r}, t) \Delta \psi(\mathbf{r}, t)) \quad (7.3)$$

egyenletet kapjuk. Mindkét oldalt teljes deriválttá alakítva, egy *kontinuitási egyenlethez* jutunk:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 , \quad (7.4)$$

ahol a (2.22) egyenlettel összhangban

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (7.5)$$

a részecske megtalálási valószínűségsűrűsége és

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\psi(\mathbf{r}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t) - \psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t)) \quad (7.6)$$

a megtalálási valószínűségi áramsűrűség.

7.1.2. Háromdimenziós potenciálszórás

Egy szórás kísérletben a részecskeforrás által kibocsájtott részecskék valamely rendszeren (targeten) keresztül mozognak, majd azokat detektorokkal fogjuk be. A bejövő és továbbhaladó részecskék áramsűrűségének ill. összáramának (intenzitásának) arányából tehetünk megállapításokat a target szerkezetére és elektronállapotaira vonatkozóan. Ehhez a feladathoz egy haladó részecskét leíró véges kiterjedésű hullámcsomag időfejlődését kell követnünk az időfüggő Schrödinger egyenlet megoldásán keresztül. Egy hullámcsomag mindig kifejezhető síkhullám bázison (Fourier-transzformáció):

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{k} \quad (7.7)$$

Mivel mind a Schrödinger-egyenlet, mind a Fourier-transzformáció lineáris, elegendő az egyenleteket egyetlen Fourier-komponensre megoldani, ezt követően megkapható az eredeti hullámcsomagunkra vonatkozó megoldás inverz Fourier-transzformációval. Ezért mi most megelégszünk egy síkhullám szórásának a leírásával. A síkhullámok nem normálhatóak, így gyakran hivatkozunk majd arra, hogy a szórási állapotok nem normálhatóak, ami az axiómákkal összevetve látszólag sok helyen gondot okozhat. Ilyenkor tartunk észben, a síkhullám előtti „normálófaktor” valójában egy Fourier-kifejtés egy komponense, és segítségével egy normálható hullámcsomagot állíthatunk elő. Emellett a valódi kísérleteknél sosincs végtelen térben mozgó részecske, a kísérleti elrendezések mindig be vannak zárva egy potenciáldobozba (a labor fala), ami szabad esetben kvantálttá teszi a hullám szám értékét. Ha azonban a potenciáldoboz nagyon nagy, akkor egyrészt a végtelen tér jó közelítés lesz, másrészt a k értékek nagyon közel esnek. Ekkor jó közelítéssel vehetjük őket folytonosnak, és dolgozhatunk egyszerűen síkhullámokkal azon az áron, hogy nem normálható hullámfüggvényeket kell kezelnünk (pl. 8.1.5 fejezet). Ezután a kis kitérő után térjünk vissza a korábbi gondolatmenetünkhöz. A targettől elegendően távol szabad megoldást tételezünk fel, azaz az időfüggő Schrödinger-egyenlet

$$i\hbar\partial_t\psi_0(\mathbf{r}, t) = H_0\psi_0(\mathbf{r}, t) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\psi_0(\mathbf{r}, t) \quad (7.8)$$

alakú, melynek síkhullám megoldása

$$\psi_0(\mathbf{r}, t) = A e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \frac{E}{\hbar}t)}, \quad (7.9)$$

ahol

$$E = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} > 0, \quad (7.10)$$

és a bejövő részecskeáram-sűrűség

$$\mathbf{j}_0 = |A|^2 \frac{\hbar\mathbf{k}}{m}. \quad (7.11)$$

Rugalmas szórás (potenciálszórás) esetén a targetet egy $V(\mathbf{r})$ időfüggetlen potenciállal írjuk le, melyről legalább azt kell feltételeznünk, hogy a végtelenben $1/r$ -nél gyorsabban cseng le, azaz $\lim_{r \rightarrow \infty} rV(\mathbf{r}) = 0$. Az időfüggő Schrödinger-egyenlet,

$$i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{r}, t) = (H_0 + V(\mathbf{r}))\psi(\mathbf{r}, t) \quad (7.12)$$

E energiájú megoldását keressük,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}, \quad (7.13)$$

ezért az időfüggő probléma megoldása visszavezethető a

$$(H_0 + V(\mathbf{r}))\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (7.14)$$

stacionárius probléma megoldására.

Lippmann-Schwinger egyenlet

A szórásprobléma megoldását bontsuk fel a bejövő részecske $\psi_0(\mathbf{r})$ hullámfüggvényének és a szórás következtében fellépő $\psi_{sz}(\mathbf{r})$ hullámfüggvény összegére:

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \psi_{sz}(\mathbf{r}). \quad (7.15)$$

Ezt a Schrödinger-egyenletbe beírva,

$$(H_0 + V(\mathbf{r}))(\psi_0(\mathbf{r}) + \psi_{sz}(\mathbf{r})) = E(\psi_0(\mathbf{r}) + \psi_{sz}(\mathbf{r})), \quad (7.16)$$

kihasználva, hogy $H_0\psi_0(\mathbf{r}) = E\psi_0(\mathbf{r})$,

$$(H_0 + V(\mathbf{r}))\psi_{sz}(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi_0(\mathbf{r}) = E\psi_{sz}(\mathbf{r}), \quad (7.17)$$

majd átrendezve, nyerjük a

$$(H_0 - E)\psi_{sz}(\mathbf{r}) = -V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \quad (7.18)$$

egyenletet.

A fenti egyenlet megoldására bevezetjük a Green-függvényt, melyet (koordináta-representációban) a következő egyenlet definiál,

$$(H_0(\mathbf{r}) - E)G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (7.19)$$

A Green-függvény éppen H_0 spektrumán, $E > 0$, nem értelmezhető, de a komplex síkon felülről ill. alulról közelítve határozott (de különböző) határértékekkel rendelkezik,

$$G_0^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) \equiv \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E \pm i\varepsilon) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (7.20)$$

ahol $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

A szórt hullámfüggvényt a Green-függvény segítségével a következő integrállal fejezhetjük ki,

$$\psi_{sz}^\pm(\mathbf{r}) = \int G_0^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) V(\mathbf{r}') \psi^\pm(\mathbf{r}') d^3r', \quad (7.21)$$

ill. a szórásprobléma teljes hullámfüggvénye eleget tesz a

$$\psi^\pm(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \int G_0^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) V(\mathbf{r}') \psi^\pm(\mathbf{r}') d^3r' \quad (7.22)$$

Lippmann-Schwinger-egyenletnek. Ez az integrálegyenlet ekvivalens a Schrödinger-egyenlettel úgy, hogy expliciten tartalmazza a $\lim_{r \rightarrow \infty} \psi^\pm(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r})$ határfeltételt is. Mivel az origóból kifutó gömbhullám alakja $e^{i(kr - Et/\hbar)}/r$, szórás kísérletek leírásában a '+' esetet tekintjük és a továbbiakban ezt külön nem jelöljük.

Born közelítés

A (7.22) Lippmann-Schwinger-egyenlet megoldását szukcesszív approximációval keressük:

$$\psi^{(0)}(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) , \quad (7.23)$$

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \int G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) V(\mathbf{r}') \psi^{(0)}(\mathbf{r}') d^3r' \quad (7.24)$$

$$\vdots \quad (7.25)$$

$$\psi^{(k+1)}(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \int G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) V(\mathbf{r}') \psi^{(k)}(\mathbf{r}') d^3r' \quad (7.26)$$

$$\vdots \quad (7.27)$$

Ezt nevezzük Born-sorozatnak. Főként gyenge szórás esetében, megelégszünk az elsőrendű közelítéssel, amit egyszerűen *Born-közelítésnek* nevezünk:

$$\psi(\mathbf{r}) \simeq \psi_0(\mathbf{r}) + \int G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) V(\mathbf{r}') \psi_0(\mathbf{r}') d^3r' . \quad (7.28)$$

Szórásamplitúdó és hatáskeresztmetszet

Mivel a detektort általában messze helyezzük el a targettól, a hullámfüggvény aszimptotikus alakját keressük. Alkalmazzuk az

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \xrightarrow{r \gg r'} r - \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r} \quad (7.29)$$

közelítést és vezessük be a $\mathbf{k}_f = k \frac{\mathbf{r}}{r}$ hullámszámvektort. A Green-függvény aszimptotikus alakja:

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) \xrightarrow{r \gg r'} -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr - \mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}'}}{r} , \quad (7.30)$$

amit behelyettesítve a (7.28) egyenletbe és kihasználva a beeső síkhullám (7.9) alakját, az

$$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \gg r'} A \left(e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\mathbf{q}) \frac{e^{ikr}}{r} \right) \quad (7.31)$$

ahol $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_f$ és $f(\mathbf{q})$ a *szórásamplitúdó*,

$$f(\mathbf{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}'} d^3r' . \quad (7.32)$$

A \mathbf{q} vektor helyett, rögzített energia mellett, a szórásamplitúdó változóinak választhatjuk a detektor irányát jellemző ϑ és φ gömbi polárkoordinátákat, $f(\vartheta, \varphi)$.

Az (ϑ, φ) irányban elhelyezkedő, $d\Omega$ térszöget befogó detektorba érkező részecskék időegységre jutó mennyiségét a koontinuitási egyenlet és a Gauss-tétel felhasználásával a következőképpen fejezhetjük ki,

$$\frac{dN(\vartheta, \varphi; d\Omega)}{dt} = \frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) r^2 d\Omega . \quad (7.33)$$

Ugyanezen mennyiség jellemzésére használjuk a *differenciális hatáskeresztmetszetet*,

$$\frac{dN(\vartheta, \varphi; d\Omega)}{dt} = j_0 \frac{d\sigma(\vartheta, \varphi)}{d\Omega} d\Omega, \quad (7.34)$$

ahol j_0 a beeső részecskék időegységre jutó fluxusa. A fentiekből a

$$\frac{d\sigma(\vartheta, \varphi)}{d\Omega} = \frac{r \mathbf{r} \mathbf{j}(\mathbf{r})}{j_0} \quad (7.35)$$

összefüggést nyerjük.

A (7.31) aszimptotikus hullámfüggvény alapján a valószínűségi áramsűrűség,

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_0 + \mathbf{j}_{sz} + \mathbf{j}_{int}, \quad (7.36)$$

ahol $\mathbf{j}_0 = \hbar |A|^2 \mathbf{k}/m$,

$$\mathbf{j}_{sz} = -\frac{\hbar |A|^2}{m} |f(\vartheta, \varphi)|^2 \operatorname{Im} \left(\frac{e^{ikr}}{r} \nabla \frac{e^{-ikr}}{r} \right) \simeq \frac{\hbar |A|^2 k}{m} |f(\vartheta, \varphi)|^2 \frac{\mathbf{r}}{r^3}, \quad (7.37)$$

és belátható, hogy aszimptotikus limeszben az \mathbf{j}_{int} interferencia tag csak az előreszórás ($\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{k}$) esetén ad járulékot. Mivel a beeső részecskeáram triviális járulékot ad a differenciális hatáskeresztmetszethez, $\frac{d\sigma_0(\vartheta, \varphi)}{d\Omega} = r^2 \mathbf{k} \hat{\mathbf{r}} = r^2 \cos \vartheta$, a szokásos definíció szerint csupán a szórt részecskék hatáskeresztmetszetét tekintjük, amire a nevezetes

$$\frac{d\sigma(\vartheta, \varphi)}{d\Omega} = |f(\vartheta, \varphi)|^2 \quad (7.38)$$

összefüggést kapjuk. A teljes szórás hatáskeresztmetszet, $\sigma = \int \frac{d\sigma(\vartheta, \varphi)}{d\Omega} d\Omega$, kiszámításánál már figyelembe kell venni az interferenciát és levezethető az ún. *optikai tétel*:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0). \quad (7.39)$$

Alakfaktor és szerkezeti tényező

A differenciális hatáskeresztmetszet számítására tehát a

$$\frac{d\sigma(\mathbf{q})}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \int V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3r \right|^2 \quad (7.40)$$

kifejezést használjuk. Tekintsünk egy azonos atomokból vagy molekulákból álló összetett targetet és az \mathbf{R}_i vektorok jelölgék a szórócentrumok pozícióvektorait. Ekkor a a target-potenciál a $V_0(\mathbf{r})$ individuális szórópotenciál segítségével a következőképpen írható fel,

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i), \quad (7.41)$$

ahol N a szórócentrumok számát jelöli. A target szórásamplitúdója:

$$f(\mathbf{q}) = f_0(\mathbf{q}) \sum_{i=1}^N e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i}, \quad (7.42)$$

ahol bevezettük az individuális szórócentrum szórási amplitúdóját, amit *alakfaktornak* hívunk:

$$f_0(\mathbf{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V_0(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3r . \quad (7.43)$$

Következésképpen, a differenciális hatáskeresztmetszet felírható a

$$\sigma(\mathbf{q}) = \sigma_0(\mathbf{q}) S(\mathbf{q}) \quad (7.44)$$

szorzatalakban, ahol $\sigma_0(\mathbf{q}) = |f_0(\mathbf{q})|^2$ egy szórócentrum differenciális hatáskeresztmetszete és

$$S(\mathbf{q}) = \sum_{i,j} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \quad (7.45)$$

a (statikus) *szerkezeti tényező*, melynek mérése információt szolgáltat az atomok (molekulák) térbeli eloszlásáról a targeten belül.

7.1.3. Parciális hullámok módszere

Főként véges kiterjedésű és (közel) gömbszimmetrikus szórópotenciál esetén, $V(r > S) = 0$, érdemes használni a szórásamplitúdók és hatáskeresztmetszet számítására a parciális hullámok módszerét. Itt a Green-függvény alábbi kifejtését használjuk:

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = -ik \frac{2m}{\hbar^2} \sum_{\ell, m} j_\ell(kr_<) h_\ell^+(kr_>) Y_\ell^m(\hat{\mathbf{r}}) Y_\ell^m(\hat{\mathbf{r}})^* , \quad (7.46)$$

ahol $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, $r_< = \min(r, r')$, $r_> = \max(r, r')$, valamint $j_\ell(x)$, $n_\ell(x)$ és $h_\ell^\pm(x) = j_\ell(x) \pm in_\ell(x)$ rendre a gömbi Bessel-, Neumann- és Hankel-függvények és $Y_\ell^m(\hat{\mathbf{r}})$ a komplex gömbharmonikusok. Jegyezzük fel a következő aszimptotikus alakokat:

$$j_\ell(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \frac{1}{x} \sin(x - \ell\frac{\pi}{2}) \quad n_\ell(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} -\frac{1}{x} \cos(x - \ell\frac{\pi}{2}) \quad h_\ell^\pm(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} (\mp i)^{\ell+1} \frac{\exp(\pm ix)}{x} . \quad (7.47)$$

Behelyettesítés után a (7.22) Lippmann-Schwinger-egyenlet alakja $r > S$ esetén,

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + ik \sum_{\ell, m} i^\ell h_\ell^+(kr) Y_\ell^m(\hat{\mathbf{r}}) c_{\ell m} , \quad (7.48)$$

ahol

$$c_{\ell m} = -\frac{2mi^{-\ell}}{\hbar^2} \int_{r \leq S} j_\ell(kr) Y_\ell^m(\hat{\mathbf{r}})^* V(r) \psi(\mathbf{r}) d^3r . \quad (7.49)$$

Felhasználva az

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{\ell, m} i^\ell j_\ell(kr) Y_\ell^m(\hat{\mathbf{r}}) Y_\ell^m(\hat{\mathbf{k}})^* = \sum_{\mathbf{k}=k\hat{\mathbf{z}}} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} i^\ell j_\ell(kr) Y_\ell^0(\hat{\mathbf{r}}) , \quad (7.50)$$

kifejtést $(Y_\ell^m(\hat{\mathbf{z}}) = \delta_{m,0} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}})$, $\psi(\mathbf{r})$ parciális hullámokra bontható:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\ell, m} R_{\ell m}(r) Y_\ell^m(\hat{\mathbf{r}}) , \quad (7.51)$$

és a radiális hullámfüggvényekre vonatkozó Lippmann-Schwinger-egyenlet:

$$R_{\ell m}(r) = \sqrt{4\pi(2\ell+1)} i^\ell j_\ell(kr) \delta_{m,0} + i^{\ell+1} k h_\ell^+(kr) c_{\ell m} , \quad (7.52)$$

$$c_{\ell m} = -\frac{2mi^{-\ell}}{\hbar^2} \int_0^S j_\ell(kr) V(r) R_{\ell m}(r) r^2 dr . \quad (7.53)$$

A fenti két egyenlet szukcesszív megoldásából azonnal látható, hogy $R_{\ell m}(r)$ és $c_{\ell m}$ csupán $m = 0$ -ra különböznek zérustól, azaz

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_\ell R_\ell(r) P_\ell(\cos\vartheta) , \quad (7.54)$$

ahol felhasználtuk, hogy $Y_\ell^0(\hat{\mathbf{r}}) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell(\cos\vartheta)$ (P_ℓ a Legendre polinomokat jelöli),

$$R_\ell(r) = (2\ell+1) i^\ell \left(j_\ell(kr) + \frac{ik}{\sqrt{4\pi(2\ell+1)}} h_\ell^+(kr) c_\ell \right) , \quad (7.55)$$

és

$$c_\ell = -\frac{2mi^{-\ell}}{\hbar^2} \int_0^S j_\ell(kr) V(r) R_\ell(r) r^2 dr . \quad (7.56)$$

A Hankel-függvény aszimptotikus alakjából következik, hogy

$$\psi(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} , \quad (7.57)$$

és a szórásamplitúdóra a

$$f(\vartheta) = \sum_\ell \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} c_\ell P_\ell(\cos\vartheta) , \quad (7.58)$$

kifejtést kapjuk. Innen a teljes szórási hatáskeresztmetszet,

$$\sigma = \int d\Omega |f(\vartheta, \varphi)|^2 = \sum_\ell |c_\ell|^2 . \quad (7.59)$$

Mivel $P_\ell(1) = 1$, az optikai tétel értelmében,

$$\sum_\ell \left(|c_\ell|^2 - \frac{\sqrt{4\pi(2\ell+1)}}{k} \text{Im} c_\ell \right) = 0 , \quad (7.60)$$

aminek megoldása parciális komponensenként:

$$c_\ell = \frac{\sqrt{4\pi(2\ell+1)}}{k} e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell \quad (\delta_\ell \in \mathbb{R}) . \quad (7.61)$$

A δ_ℓ paramétert *fázistolásnak* nevezzük, ugyanis

$$\begin{aligned} R_\ell(r) &\sim j_\ell(kr) + ie^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell h_\ell^+(kr) = j_\ell(kr) (1 + ie^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell) - n_\ell(kr) e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell \\ &\sim j_\ell(kr) \cos \delta_\ell - n_\ell(kr) \sin \delta_\ell \underset{r \rightarrow \infty}{\rightarrow} \frac{1}{kr} \sin \left(kr - \ell \frac{\pi}{2} + \delta_\ell \right) , \end{aligned} \quad (7.62)$$

azaz aszimptotikusan a parciális hullám fázisa éppen δ_ℓ -vel tolódik el a szórás nélküli esethez képest. A fázistolások meghatározhatók a radiális hullámfüggvény ill. a derivált illesztésével az $r = S$ gömbsugárnál. Segítségükkel a szórásamplitudó és a teljes hatáskeresztmetszet könnyen meghatározható:

$$f(\vartheta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell} (2\ell + 1) e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell P_\ell(\cos \vartheta) , \quad (7.63)$$

és

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell . \quad (7.64)$$

7.1.4. Egydimenziós szórás, alagúteffektus

Számos esetben (pl. kvázi-egydimenziós rendszerek, kétdimenziós translációs-szimmetriával rendelkező határfelületek) az elektronok szóródását jó közelítéssel a

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) - E \right) \psi(x) = 0 \quad (7.65)$$

egydimenziós Schrödinger-egyenlettel írhatjuk le. Egy balról jobbra haladó ($x = -\infty \rightarrow x = \infty$) síkhullám térfüggő része e^{ikx} , míg a fordított irányban haladóé e^{-ikx} . A megfelelő határfeltétel mellett keressük a (7.65) egyenlet megoldását úgy, hogy a potenciál (véges) szakadásainál a hullámfüggvényt és annak deriváltját folytonosan illesztjük.

Példaként tekintsük a véges négyszög alakú *potenciállal* esetét:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{I. tartomány} & x \leq -a \\ V_0 > 0 & \text{II. tartomány} & -a < x \leq 0 \\ 0 & \text{III. tartomány} & x > 0 \end{cases} . \quad (7.66)$$

Legyen a balról bejövő részecske energiája $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Az I. tartományban a hullámfüggvény a bejövő és visszaverődő hullám lineárkombinációja,

$$\psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} , \quad (7.67)$$

míg a III. tartományban csak áthaladó hullám van:

$$\psi_{III}(x) = Ce^{ikx} . \quad (7.68)$$

Az I. tartományban a valószínűségi áramsűrűség,

$$j_I(x) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\psi_I^*(x) \frac{d\psi_I(x)}{dx} \right) = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} - |B|^2 \frac{\hbar k}{m} + \frac{\hbar}{m} \underbrace{\text{Im} (iB^* A e^{2ikx} - iA^* B e^{-2ikx})}_0 , \quad (7.69)$$

ami tehát a bejövő és visszaverődő (reflektált) hullám áramsűrűségének összege:

$$j_I = j_i + j_r , \quad (7.70)$$

$$j_i = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} \quad j_r = -|B|^2 \frac{\hbar k}{m} . \quad (7.71)$$

A visszaverődési (reflexiós) együttható a két áramsűrűség aránya,

$$R = \frac{-j_r}{j_i} = \left| \frac{B}{A} \right|^2 . \quad (7.72)$$

A III. tartományban az áramsűrűség,

$$j_{III} = j_t = |C|^2 \frac{\hbar k}{m} , \quad (7.73)$$

mellyel az áthaladási (transzmissziós) együttható definiálható:

$$T = \frac{j_t}{j_i} = \left| \frac{C}{A} \right|^2 . \quad (7.74)$$

Mivel a II. tartományban nem keletkezik részecsketöbblet, $\frac{d}{dt} \int_{II} dx \rho(x, t) = 0$, a kontinuitási egyenletből következik, hogy

$$j_i + j_r = j_t , \quad (7.75)$$

amiből a reflexiós és transzmissziós tényező közötti alapvető összefüggés adódik,

$$R + T = 1 . \quad (7.76)$$

A II. tartományban a Schrödinger-egyenlet általános megoldása

$$\psi_{II}(x) = Fe^{i\alpha x} + Ge^{-i\alpha x} , \quad (7.77)$$

ahol,

$$E - V_0 = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} . \quad (7.78)$$

A B, C, F és G paraméterek meghatározására írjuk fel az illesztési egyenleteket:

$$\psi_I(-a) = \psi_{II}(-a) \implies Ae^{-ika} + Be^{ika} = Fe^{-i\alpha a} + Ge^{i\alpha a} \quad (7.79)$$

$$\psi'_I(-a) = \psi'_{II}(-a) \implies Ake^{-ika} - Bke^{ika} = F\alpha e^{-i\alpha a} - G\alpha e^{i\alpha a} \quad (7.80)$$

↓

$$(I) \quad A(\alpha + k)e^{-ika} + B(\alpha - k)e^{ika} = 2F\alpha e^{-i\alpha a} \quad (7.81)$$

$$(II) \quad A(\alpha - k)e^{-ika} + B(\alpha + k)e^{ika} = 2G\alpha e^{i\alpha a} , \quad (7.82)$$

valamint,

$$\psi_{II}(0) = \psi_{III}(0) \implies F + G = C \quad (7.83)$$

$$\psi'_{II}(0) = \psi'_{III}(0) \implies (F - G)\alpha = kC \quad (7.84)$$

↓

$$(III) 2F\alpha = C(\alpha + k) \quad (7.85)$$

$$(IV) 2G\alpha = C(\alpha - k) . \quad (7.86)$$

A megjelölt négy egyenlet további kombinálásával a következő eredmények kaphatók:

$$\frac{B}{A} = \frac{(k^2 - \alpha^2)(1 - e^{2i\alpha a})}{(k + \alpha)^2 - (k - \alpha)^2 e^{2i\alpha a}} e^{-2ika} \quad (7.87)$$

$$\frac{C}{A} = \frac{4k\alpha}{(k + \alpha)^2 - (k - \alpha)^2 e^{2i\alpha a}} e^{i(\alpha - k)a} \quad (7.88)$$

↓

$$R = \left(1 + \frac{4k^2\alpha^2}{(k^2 - \alpha^2)^2 \sin^2 \alpha a} \right)^{-1} \quad (7.89)$$

$$T = \left(1 + \frac{(k^2 - \alpha^2)^2 \sin^2 \alpha a}{4k^2\alpha^2} \right)^{-1} , \quad (7.90)$$

amiből látható, hogy erre a konkrét esetre is teljesül a (7.76) egyenlőség.

Vizsgáljuk meg pontosabban a transzmissziós együtthatót:

$$T = \left(1 + \frac{V_0^2 \sin^2 \left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} (E - V_0) a \right)}{4E(E - V_0)} \right)^{-1} . \quad (7.91)$$

Érdekes, hogy az energiával felülről közelítve V_0 -hoz,

$$\lim_{E \rightarrow V_0+0} T = \left(1 + \frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2} \right)^{-1} < 1 , \quad (7.92)$$

tehát a klasszikus szórással ellentétben ($R = 0$ és $T = 1$ értékeket várnánk), zérustól különbözik a reflexiós tényező. Tökéletes áthaladást észlelünk viszont a

$$E_n = V_0 + \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (7.93)$$

diszkrét energiaértékeknél.

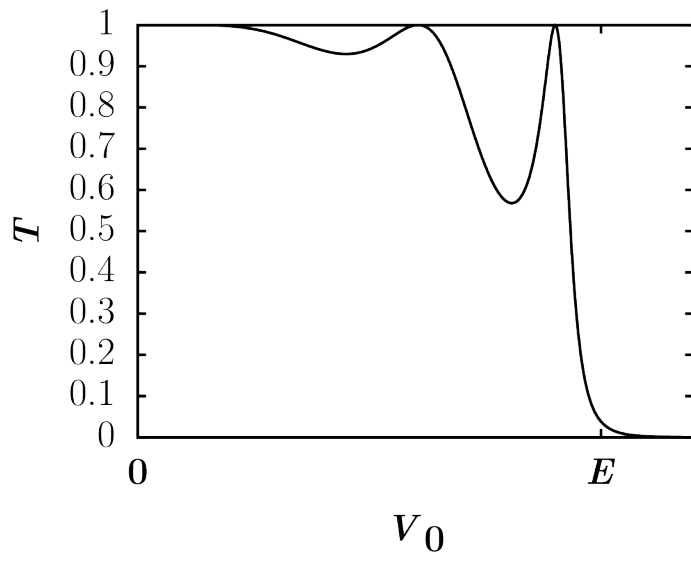
Ha az energia kisebb, mint a potenciálfal magassága ($E < V_0$),

$$T = \left(1 + \frac{V_0^2 \sinh^2 \left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} (V_0 - E) a \right)}{4E(V_0 - E)} \right)^{-1} > 0 , \quad (7.94)$$

azaz ismétellen ellentétben a klasszikus elvárással, mindig van áthaladó intenzitás. Ezt hívjuk *alagúteffektusnak*. Az energiafüggő lecsengési hosszhoz ($\lambda = 1/\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} (V_0 - E)$) képest széles barrier esetén, az áthaladási együtthatót exponenciális függvény írja le:

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp \left(-\sqrt{\frac{8m}{\hbar^2}} (V_0 - E) a \right) . \quad (7.95)$$

A transzmisszió V_0 -tól való függése az alábbi ábrán látható:



7.2. Feladatok

7.2.1. Példák

7.1. Feladat Számítsa ki a balról beeső egydimenziós síkhullám T áthaladási és R visszaverődési együtthatóját a

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{ha } x \geq 0 \\ 0 & \text{ha } x < 0 \end{cases} \quad (7.96)$$

potenciálgáton! Mennyi ezek összege? Diskutálja külön a következő eseteket:

a) $V_0 > E$

b) $0 < E < V_0$

7.2. Feladat Számítsuk ki a visszaverődési és áthatolási együtthatókat az egydimenziós

$$V(x) = K\delta(x) \quad (7.97)$$

Dirac-delta potenciál esetére! Milyen kapcsolatban vannak ezek vonzó potenciál esetén a kötött állapottal?

7.3. Feladat Adott a következő egydimenziós potenciál:

$$V(x) = \begin{cases} K\delta(x+a) & \text{ha } x < 0 \\ \infty & \text{ha } x > 0 \end{cases}, \quad (7.98)$$

ahol $K > 0$ és $a > 0$. Számítsa ki egy balról beeső síkhullám R visszaverődési tényezőjét ill. a δ -potenciálon áthaladó hullám amplitúdóját! Milyen energiáknál vannak R lokális minimumhelyei (rezonanciák), amit virtuális energiaszinteknek nevezünk? Mi R értéke ezeken az energiákon?

7.4. Feladat Írjuk le a

$$V(x) = - \sum_{k=-\infty}^{\infty} K\delta(x - ka) \quad (7.99)$$

egydimenziós periodikus potenciáltérben mozgó részecske lehetséges kötött ill. szórásállapot energiáit a $K > 0$ választása mellett!

Segítség: Vizsgáljuk meg, hogy milyen feltételt ró ki a hullámfüggvényre az a -val való eltolási invariancia! Tekintsünk ezután először egy N darab Dirac-deltából álló véges láncot periodikus peremfeltétellel: $\Psi(x + Na) = \Psi(x)$. Oldjuk meg egy Delta-potenciál két oldalán vett hullámfüggvényre felírható peremfeltételekből kapott egyenleteket, majd vizsgáljuk ezek megoldhatósági tartományát.

7.5. Feladat Adott egy $V(r)$ gömbszimmetrikus potenciál, melyre fennáll, hogy $V(r) = 0$, ha $r \geq R$. Valamely $E > 0$ energiára tekintsük ismertnek a Schrödinger-egyenlet parciális megoldását,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \right] \Psi_{\ell m}(E, \mathbf{r}) = E\Psi_{\ell m}(E, \mathbf{r}) \quad (r \leq R), \quad (7.100)$$

ahol $\Psi_{\ell m}(E, \mathbf{r}) = R_{\ell}(E, r) Y_{\ell}^m(\vartheta, \varphi)$. Vezesse le az ℓ -ik parciális hullám fázistolásának meghatározására szolgáló összefüggést ($\tan \delta_{\ell}(E)$)! Keressük a megoldást $r > R$ esetén az

$$R_{\ell}(E, r) \sim j_{\ell}(kr) \cos \delta_{\ell}(E) - n_{\ell}(kr) \sin \delta_{\ell}(E) \quad (7.101)$$

alakban!

7.6. Feladat A parciális hullámok módszere alapján számítsuk ki egy 'merev' golyó parciális fázistolásait! Határozzuk meg a teljes hatáskeresztmetszetet

a) alacsony energiás határesetben,

b) nagyenergiás határesetben!

7.7. Feladat A parciális hullámok módszere alapján számítsa ki a

$$V(r) = K\delta(r - R) \quad (7.102)$$

(δ -héj) potenciálra a parciális fázistolásokat!

Segítség: Használjuk fel, hogy szeférikus Bessel- és Neumann-függvények ún. Wronski-determinánsa:

$$j'_{\ell}(x)n_{\ell}(x) - j_{\ell}(x)n'_{\ell}(x) = \frac{1}{x^2}. \quad (7.103)$$

7.8. Feladat Vizsgáljuk a puha golyón,

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{ha } r \leq a \\ 0 & \text{ha } r > a \end{cases}. \quad (7.104)$$

való szóródást!

a) Számítsa ki az $\ell = 0$ impulzusmomentum sajátértékhez tartozó parciális fázistolás tangensét!

b) Mekkora a teljes hatáskeresztmetszet az alacsony energiás ($Ea^2 \rightarrow 0$) határesetben?

c) Hogyan kaphatjuk meg a fenti eredmény alapján a merev gömb, ($V_0 \rightarrow -\infty$, azaz erős taszító potenciál) alacsony energiás teljes hatáskeresztmetszetét? ($\sigma = 4\pi a^2$)

7.9. Feladat Számítsuk ki első rendű Born közelítésben a szórásamplitúdót, valamint a differenciális és teljes hatáskeresztmetszetet! A c) esetben (Yukawa-potenciál) diszkutáljuk a Coulomb-szórás esetét!

a) $V(r) = V_0 e^{-\frac{r^2}{r_0^2}}$

b) $V(r) = V_0 e^{-\frac{r}{r_0}}$

c) $V(r) = \frac{\alpha}{r} e^{-\frac{r}{r_0}}$

d) $V(r) = \begin{cases} V_0, & \text{ha } r < r_0 \\ 0, & \text{ha } r > r_0 \end{cases}$

7.2.2. Megoldások

7.1 Megoldás a) *Először tekintsük azt az esetet, amikor a beeső síkhullám energiája magasabb a potenciálgátnál! Ilyenkor a balról, $x \rightarrow -\infty$ felől érkező és a potenciálgáton visszaverődő hullám alakja*

$$\psi_1(x) = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x}, \quad \text{ha } x < 0, \quad (7.105)$$

illetve a lépcső oldalán az áthaladó síkhullám alakja

$$\psi_2(x) = Ce^{i\beta x}, \quad \text{ha } x \geq 0, \quad (7.106)$$

ahol a két tartományban a hullámszám értéke

$$\alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \beta = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}. \quad (7.107)$$

A síkhullám illetve deriváltjának folytonossága

$$\begin{aligned} \psi_1(0) &= \psi_2(0) \Rightarrow A + B = C \\ \psi_1'(0) &= \psi_2'(0) \Rightarrow i\alpha(A - B) = i\beta C \end{aligned}$$

miatt a B és C együtthatókat az alábbiak szerint lehet kifejezni

$$B = \frac{\alpha - \beta}{\alpha + \beta}A \quad \text{illetve} \quad C = \frac{2\alpha}{\alpha + \beta}A. \quad (7.108)$$

Ezek alapján meghatározzuk a beeső, a visszaverődő illetve az áthaladó hullámhoz rendelhető áramsűrűséget. Megmutatjuk, hogy az áramsűrűségek esetén a visszavert és a tovább haladó érték összege megegyezik a beesőével. A beeső, a visszavert illetve az áthaladó áramsűrűségek rendre

$$j_i = \frac{\hbar\alpha}{m}|A|^2, \quad j_r = -\frac{\hbar\alpha}{m}|B|^2, \quad j_t = \frac{\hbar\beta}{m}|C|^2, \quad (7.109)$$

Az visszavert illetve áthaladó áramsűrűségeket a beesőhöz viszonyítva

$$R = -\frac{j_r}{j_i} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{\alpha - \beta}{\alpha + \beta} \right|^2, \quad T = \frac{j_t}{j_i} = \frac{\beta |C|^2}{\alpha |A|^2} = \frac{4\alpha\beta}{(\alpha + \beta)^2} \quad (7.110)$$

amiből könnyen belátható, hogy

$$T + R = \left(\frac{2\alpha}{\alpha + \beta} \right)^2 \frac{\beta}{\alpha} + \frac{(\alpha - \beta)^2}{(\alpha + \beta)^2} = 1. \quad (7.111)$$

Vezessünk be egy új változót a potenciálgát és az energia viszonyára, $v = V_0/E$, mert mind R , mind pedig T kifejezhető ezzel a paraméterrel

$$B = \frac{1 - \sqrt{1 - v}}{1 + \sqrt{1 - v}}A, \quad \text{illetve} \quad C = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - v}}A. \quad (7.112)$$

b) Tekintsük most azt az esetet, amikor a beeső hullám energiája kisebb a potenciálgát magasságánál, $0 < E < V_0$. Ekkor a megfelelő megoldások

$$\psi_1(x) = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x}, \text{ ha } x < 0, \psi_2(x) = Ce^{-\beta x}, \text{ ha } x \geq 0, \quad (7.113)$$

ahol

$$\alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \beta = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}. \quad (7.114)$$

A hullámfüggvények folytonosságából

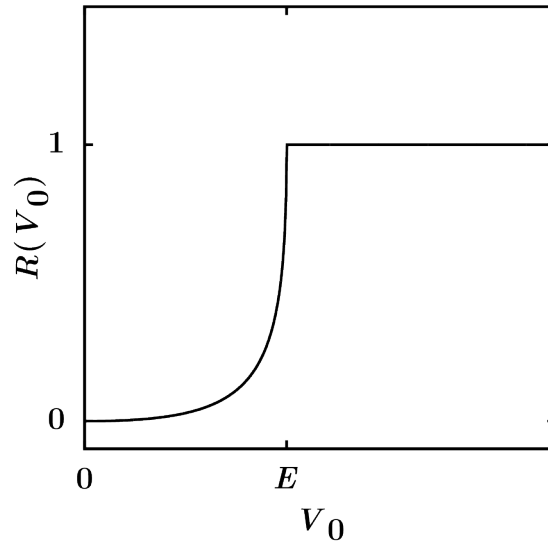
$$A + B = C \quad i\alpha(A - B) = -\beta C, \quad (7.115)$$

amiből

$$B = \frac{i\alpha + \beta}{i\alpha - \beta}A \quad \text{illetve} \quad C = \frac{2i\alpha}{i\alpha - \beta}A, \quad (7.116)$$

ahonnan jól látszik, hogy $R = 1$ illetve $j_t = 0 \Rightarrow T = 0$.

Az R reflexiós tényező menete a 7.1 ábrán látható



7.1. ábra. R reflexiós együttható V_0 függvényében végtelen széles potenciáldoboz esetén.

7.2 Megoldás A delta potenciálra balról beeső, visszaverődő illetve jobbra áthaladó hullámok, a következő alakúak

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \text{ ha } x < 0 \quad \psi_2(x) = Ce^{ikx}, \text{ ha } x > 0, \quad (7.117)$$

melynek folytonossági feltétele illetve a delta-függvény deriváltjai közötti összefüggést leíró (2.122) egyenlet szerint

$$A + B = C \quad \text{illetve} \quad ik(C - A + B) = -\frac{2mK}{\hbar^2}C, \quad (7.118)$$

aminek a $\gamma = 2mKa/\hbar^2$ helyettesítéssel

$$B = \frac{i\gamma}{2 - i\gamma}A \quad \text{illetve} \quad C = \frac{2}{2 - i\gamma}A. \quad (7.119)$$

Innen

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\gamma^2}{4 + \gamma^2} \quad \text{illetve} \quad T = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4}{4 + \gamma^2}, \quad (7.120)$$

Vagyis $R + T = 1$ teljesül. Fontos megjegyezni, hogy mind a visszaverődési, B , mind pedig az áthaladási, C , együttható divergál, ha $i\gamma = 2$, azaz, ha

$$E = -\frac{mK^2}{2\hbar^2}, \quad (7.121)$$

vagyis a kötött állapot energiájánál.

7.3 Megoldás A balról beeső és visszavert, $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ hullámszámú síkhullám szuperpozíciója

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad \text{ha } x < -a, \quad (7.122)$$

míg a delta potenciál és a végtelen fal között

$$\psi_2(x) = C \sin(kx), \quad \text{ha } -a < x < 0, \quad (7.123)$$

végül a pozitív féltérben a megoldás a végtelen potenciálfal miatt azonosan zérus. Ennek megfelelően a megoldás az $x = -a$ pontban folytonos,

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = -C \sin(ka) \quad (7.124)$$

illetve érvényes rá a delta-potenciál esetén a deriváltakra megismert (2.122) egyenlet szerinti összefüggés

$$Ck \cos ka - ik(Ae^{-ika} - Be^{ika}) = \frac{2mK}{\hbar^2}C \sin ka, \quad (7.125)$$

Szorozzuk be mindkét oldalt a -val, vezessük be az $\alpha = ka$, illetve a $\gamma = \frac{2mK}{\hbar^2}$ mennyiségeket, és rendezzük át az egyenletet:

$$C(\alpha \cos \alpha - \gamma a \sin \alpha) = i\alpha(Ae^{-ika} - Be^{ika}) \quad (7.126)$$

A (7.124) egyenletből behelyettesítve C -t, bevezetve a $\beta = \alpha \cot \alpha - \gamma a$ mennyiséget, illetve kifejezve B -t és C -t kapjuk a következőt:

$$B = \frac{i\alpha + \beta}{i\alpha - \beta}e^{-2i\alpha}A, \quad C = \frac{4\alpha}{(i\alpha - \beta)(e^{2i\alpha} - 1)}A \quad (7.127)$$

Az áramsűrűségek vizsgálatából:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1, \quad j_t = 0 \Rightarrow T = 0 \quad (7.128)$$

Vagyis természetesen a végtelen potenciálfal miatt nincs folyamatos részecskeáram jobbra, teljes a visszaverődés stacionárius esetben. A delta-potenciál illetve a végtelen fal közötti

térrészben a megoldás C együtthatója bizonyos esetekben azonban divergálhat is. A nevezőben levő $i\alpha - \beta$ sosem lehet zérus, de bizonyos k értékeknél a másik tényező, $e^{2i\alpha} - 1$, igen. Ennek feltétele, hogy $\alpha = ka = n\pi$ egész n -ek esetén. Ilyenkor a k meghatározásából

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, \quad (7.129)$$

amelyek a rezonáns szóródásként a rendszer virtuális energiaszintjeiként viselkednek.

7.4 Megoldás A $V(x) = - \sum_{n=-\infty}^{\infty} \gamma \delta(x - na)$ egy periodikus potenciál, tehát $V(x + a) = V(x)$. Azaz a -val elmozdulva ugyan azt látjuk, így minden mérhető mennyiségnek periodikusnak kell lennie a szerint. Tehát x -ben és $x + a$ -ban a hullámfüggvény értéke maximum egy globális fázisfaktorban térhet el: $\psi(x + a) = e^{i\varphi} \psi(x)$. Tekintsünk először egy véges N darab Dirac-deltából álló láncot periodikus peremfeltétellel: $\Psi(x + Na) = \Psi(x)$. Ekkor $\varphi = Ka$ alakot választva

$$K = \frac{2\pi}{Na} n, \quad \text{ahol } n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (7.130)$$

A probléma kötött állapotai $\gamma < 0$, szórási állapotai $\gamma > 0$ választással kaphatóak meg. Mindkét esetben a periodikusság miatt elegendő egy cellára (egy Dirac-delta két oldalára) vizsgálni a problémát. Bevezetve az $\alpha = \sqrt{2m|E|}/\hbar^2$ mennyiséget a következőt kapjuk kötött állapotokra:

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x}, & \text{ha } -a < x < 0 \\ \Psi(x) &= Ae^{\alpha x - \alpha a + i\varphi} + Be^{-\alpha x + \alpha a + i\varphi}, & \text{ha } 0 < x < a \end{aligned}$$

Szórási állapotokra bevezetve $k = \sqrt{2m|E|}/\hbar^2$ -t, azaz $\alpha = ik$ mellett:

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= A \sin(kx) + B \cos(kx), & \text{ha } -a < x < 0 \\ \Psi(x) &= e^{-iKa} [A \sin(k(x+a)) + B \cos(k(x+a))], & \text{ha } 0 < x < a \end{aligned}$$

Mindkét esetben kihasználva, hogy $\Psi(x)$ folytonos $x = 0$ -ban, illetve hogy Ψ' megváltozása $\Delta\Psi' = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\Psi(0)$. A megoldásokat ide behelyettesítve kötött állapotokra a

$$\cos \varphi = \cosh(\alpha a) - \frac{\beta}{2\alpha} \sinh(\alpha a) \quad (7.131)$$

kifejezést kapjuk, ahol $\beta = \frac{2m\gamma}{\hbar^2}$, szórási állapotokra pedig a

$$\cos(Ka) = \cos(ka) - \frac{\beta}{2k} \sin(ka) \quad (7.132)$$

formulát. Mindkét esetben a bal oldalon szereplő koszinusz függvény korlátossága írja elő, hogy mely αa illetve ka intervallumokban létezik megoldás (sáv) vagy pedig tiltott a megoldás (gap). A megoldások N növelésével egyre sűrűsödnek a sávban, az $N \rightarrow \infty$ limeszben pedig kitöltik a teljes sávot. Ha most a Dirac-deltákat atomi potenciálok közelítésének tekintjük, akkor láthatjuk, hogy a modell épp kristályos rendbe (szilárd halmazállapot) állt atomok között mozgó elektronokra ad modellt. Ez az egyik legegyszerűbb, sávokból és ezek közti gapekből álló modellje a szilárd anyagoknak.

7.5 Megoldás A teret két tartományra oszthatjuk aszerint, hogy a potenciál hol végtelen, illetve hol 0:

$$\psi_{<}(r), \quad \text{ha } x < R \quad \psi_{>}(r) = R_\ell(r)Y_\ell^m(\hat{r}), \quad \text{ha } r \geq R, \quad (7.133)$$

Innen $r \geq R$ esetén a következő radiális Schrödinger-egyenletet kapjuk:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) R_\ell(r) = 0, \quad \text{ahol } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (7.134)$$

Keressük a radiális hullámfüggvényt a következő alakban:

$$R_\ell(r) = A_\ell(k)j_\ell(kr) + B_\ell(k)n_\ell(kr) \quad (7.135)$$

Ez az $r \rightarrow \infty$ limeszben

$$R_\ell(r \rightarrow \infty) = \frac{A_\ell(k)}{kr} \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right) + \frac{B_\ell(k)}{kr} \cos\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right) \quad (7.136)$$

alakú. Bevezetve $C_\ell(k) = \sqrt{A_\ell^2(k) + B_\ell^2(k)}$ valamint $\cos \delta_\ell(k) = A_\ell(k)/C_\ell(k)$ és $\sin \delta_\ell(k) = B_\ell(k)/C_\ell(k)$ változókat azt kapjuk, hogy

$$R_\ell(r \rightarrow \infty) = \frac{C_\ell(k)}{kr} \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} - \delta_\ell(k)\right) \quad (7.137)$$

Vagyis $R_\ell(r)$ a következő alakú:

$$R_\ell(r) = C_\ell(k) [\cos \delta_\ell(k)j_\ell(kr) - \sin \delta_\ell(k)n_\ell(kr)] \quad (7.138)$$

$D_\ell(k) = C_\ell(k) \cos \delta_\ell(k)$ -t bevezetve:

$$R_\ell(r) = D_\ell(k) [j_\ell(kr) - \tan \delta_\ell(k)n_\ell(kr)] \quad (7.139)$$

7.6 Megoldás Mivel $r < R$ esetén a potenciál végtelen, ebben a tartományban a hullámfüggvény zérus. A (7.139) összefüggést felhasználva az $r = R$ -nél érvényes folytonossági feltételből a következőt kapjuk:

$$\tan \delta_\ell(k) = \frac{j_\ell(kR)}{n_\ell(kR)} \quad (7.140)$$

Mivel

$$j_0(kR) = \frac{\sin(kR)}{kR} \quad n_0(kR) = \frac{\cos(kR)}{kR} \quad (7.141)$$

$$\tan \delta_0(k) = -\tan(kR) \Rightarrow \delta_0(k) = -kR \quad (7.142)$$

a) Tekintsük a kis energiás határesetet: $E \rightarrow 0 \Rightarrow k \rightarrow 0$.

$$j_\ell(kR) \rightarrow \frac{(kR)^\ell}{(2\ell+1)!!} + \mathcal{O}((kR)^{\ell+2}) \quad (7.143)$$

$$n_\ell(kR) \rightarrow \frac{(2\ell-1)!!}{(kR)^{\ell+1}} + \mathcal{O}((kR)^{-\ell+1}) \quad (7.144)$$

Tehát

$$\tan \delta_\ell(k) \rightarrow \frac{(kR)^{2\ell+1}}{(2\ell-1)!! \cdot (2\ell+1)!!} + \mathcal{O}((kR)^{2\ell+3}) \quad (7.145)$$

Azaz

$$\sin^2 \delta_\ell(k) = \frac{\tan^2 \delta_\ell(k)}{1 + \tan^2 \delta_\ell(k)} \approx \frac{(kR)^{4\ell+2}}{((2\ell-1)!! \cdot (2\ell+1)!!)^2} + \mathcal{O}((kR)^{4\ell+6}) \quad (7.146)$$

Az ℓ -es tag hozzájárulása tehát a hatáskeresztmetszethez:

$$\sigma_\ell(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell(k) = \frac{4\pi(2\ell+1)}{((2\ell-1)!! \cdot (2\ell+1)!!)^2} k^{4\ell} R^{4\ell+2} + \mathcal{O}((kR)^{4\ell+4}), \quad (7.147)$$

mely $\ell \neq 0$ esetben $k \rightarrow 0$ limeszben eltűnik. Azaz

$$\sigma_\ell(0) = 4\pi R^2 \delta_{\ell,0} \quad (7.148)$$

Így a teljes hatáskeresztmetszet:

$$\sigma^{tot}(0) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_\ell(0) = 4\pi R^2 \quad (7.149)$$

b) Tekintsük most a nagy energiás limeszt: $E \rightarrow \infty \Rightarrow k \rightarrow \infty$. Tudjuk, hogy

$$j_\ell(x) \rightarrow \frac{\sin(x - \frac{\ell\pi}{2})}{x} \quad \text{és} \quad n_\ell(x) \rightarrow -\frac{\cos(x - \frac{\ell\pi}{2})}{x}, \quad \text{ha } x \rightarrow \infty \quad (7.150)$$

Ebből következően

$$\tan \delta_\ell(k) = -\tan\left(kR - \frac{\ell\pi}{2}\right) \Rightarrow \delta_\ell(k) = -kR + \frac{\ell\pi}{2} \quad (7.151)$$

$$\begin{aligned} \sigma^{tot}(k) &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\ell_{max}} (2\ell+1) \sin^2\left(\frac{\ell\pi}{2} - kR\right) = \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \left(\sin^2(kR) + \sin^2\left(\frac{\pi}{2} - kR\right) \right) + 2 \left(\sin^2\left(\frac{\pi}{2} - kR\right) + \sin^2(\pi - kR) \right) + \\ &\quad + (\ell+1) \left(\sin^2\left(\frac{\ell\pi}{2} - kR\right) + \underbrace{\sin^2\left(\frac{(\ell+1)\pi}{2} - kR\right)}_{\cos^2(\frac{\ell\pi}{2} - kR)} \right) = \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\ell_{max}} \ell = \frac{4\pi}{k^2} \frac{\ell_{max}(\ell_{max}+1)}{2} \approx \frac{2\pi \ell_{max}^2}{k^2} \end{aligned}$$

A $k \rightarrow \infty$ limeszt vegyük úgy, hogy a fenti szumma összegzésekor legyen $\ell_{max} = kR$, így

$$\sigma^{tot}(k \rightarrow \infty) = 2\pi R^2 \quad (7.152)$$

7.7 Megoldás

$$\psi_1(r) = j_\ell(kr), \quad \text{ha } r < R \quad \psi_2(r) = j_\ell(kr) - \tan \delta_\ell n_\ell(kr), \quad \text{ha } r > 0, \quad (7.153)$$

Peremfeltételek:

$$\begin{aligned} \psi_1(R) &= \psi_2(R) && (\psi(R) \text{ folytonos}) \\ \psi_2'(R) - \psi_1'(R) &= \frac{2mK}{\hbar^2} \psi_2(R) && (\psi'(R) \text{ folytonos}) \end{aligned}$$

Azaz:

$$j_\ell(kR) = j_\ell(kR) - \tan(\delta_\ell) n_\ell(kR) \quad (7.154)$$

$$kj_\ell'(kR) - k \tan(\delta_\ell) n_\ell'(kR) - kj_\ell'(kR) = \frac{2mK}{\hbar^2} j_\ell(kR) \quad (7.155)$$

Ebből átrendezés után a két egyenletet elosztva egymással:

$$\frac{kj_\ell'(kR) - k \tan(\delta_\ell) n_\ell'(kR)}{j_\ell(kR) - \tan(\delta_\ell) n_\ell(kR)} = \frac{2mK}{\hbar^2} + \ell \frac{j_\ell'(kR)}{j_\ell(kR)} \quad (7.156)$$

Némi átalakítás után ebből megkaphatjuk, hogy

$$k \tan \delta_\ell \underbrace{(j_\ell'(kR) n_\ell(kR) - n_\ell'(kR) j_\ell(kR))}_{\frac{1}{k^2 R^2}} + \tan \delta_\ell \frac{2mK}{\hbar^2} n_\ell(kR) j_\ell(kR) = \frac{2mK}{\hbar^2} j_\ell^2(kR) \quad (7.157)$$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2mK k^2 R^2} + n_\ell(kR) j_\ell(kR) \right) \tan \delta_\ell = j_\ell^2(kR) \quad (7.158)$$

$$\tan \delta_\ell = \frac{j_\ell^2(kR)}{\frac{\hbar^2}{2mK k^2 R^2} + n_\ell(kR) j_\ell(kR)} \quad (7.159)$$

7.8 Megoldás a) Tárgyaljuk először a $V_0 > 0$ (vonzó potenciál) esetet. A radiális Schrödinger-egyenlet a következő alakú:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) R_\ell(r) = 0 \quad (7.160)$$

Ez az $\ell = 0$ esetben az a -nál kisebb illetve nagyobb távolság esetén:

$$\frac{d^2 R_{01}(r)}{dr^2} + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)}_{K^2} R_{01}(r) = 0, \quad \text{ha } r < a \quad \Rightarrow R_{01}(r) = A \sin(Kr) \quad (7.161)$$

$$\frac{d^2 R_{02}(r)}{dr^2} + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{k^2} R_{02}(r) = 0, \quad \text{ha } r > a \quad \Rightarrow R_{02}(r) = B \sin(kr + \delta_0) \quad (7.162)$$

R és R' folytonosságából kapjuk, hogy:

$$A \sin(Ka) = B \sin(ka + \delta_0) \quad \text{illetve} \quad AK \cos(Ka) = Bk \cos(ka + \delta_0) \quad (7.163)$$

Innen:

$$\tan(ka + \delta_0) = \frac{k}{K} \tan(Ka) \quad (7.164)$$

Másfelől viszont

$$\tan(ka + \delta_0) = \frac{\sin(ka) \cos(\delta_0) + \cos(ka) \sin(\delta_0)}{\cos(ka) \cos(\delta_0) - \sin(ka) \sin(\delta_0)} = \frac{\tan(ka) + \tan(\delta_0)}{1 - \tan(ka) \tan(\delta_0)} \quad (7.165)$$

A két egyenlet összevetéséből átrendezés után adódik, hogy

$$\tan(\delta_0) = \frac{k \tan(Ka) - K \tan(ka)}{K + k \tan(Ka) \tan(ka)} \quad (7.166)$$

b) Bevezetve a $\kappa^2 = 2mV_0/\hbar^2$ jelölést, a kis energiás limeszben ($\tan(ka)$ -t ka -val közelítve):

$$\delta_0 \approx \tan(\delta_0) \approx ka \left(\frac{1}{\kappa a} \tan(\kappa a) - 1 \right) \quad (7.167)$$

Így a hatáskeresztmetszetre a következőt kapjuk:

$$\sigma_0 = 4\pi a^2 \left(1 - \frac{1}{\kappa a} \tan(\kappa a) \right)^2 \quad (7.168)$$

Rezonancia szórásról beszélünk, ha ez divergál, mely a következő V_0 értéknél következik be:

$$\kappa a = (2n + 1) \frac{\pi}{2} \quad (7.169)$$

$$\kappa^2 a^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} = (2n + 1)^2 \frac{\pi^2}{4} \quad (7.170)$$

$$V_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} (2n + 1)^2 \quad (7.171)$$

c) Tekintsük ezek után a $V_0 < 0$ (taszító potenciál) esetét: Ekkor nincs más dolgunk, mint a szórási hatáskeresztmetszet formulájában κ helyébe $i\kappa$ -t írni ($\kappa = \sqrt{2mV_0/\hbar^2}$). Mivel

$$\frac{\tan(i\kappa a)}{i\kappa a} = \frac{\tanh(\kappa a)}{\kappa a} \quad (7.172)$$

σ_0 kifejezése a következő alakot ölti:

$$\sigma_0 = 4\pi a^2 \left(1 - \frac{1}{\kappa a} \tanh(\kappa a) \right)^2 \quad (7.173)$$

Ekkor a $|V_0| \rightarrow \infty$ limeszben $\kappa a \rightarrow \infty$ ezért

$$\lim_{|V_0| \rightarrow \infty} \sigma_0 = 4\pi a^2 \quad (7.174)$$

7.9 Megoldás a)

$$f(\vartheta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \int \int dx dy dz V_0 e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{r_0^2}} e^{i(q_x x + q_y y + q_z z)} \quad (7.175)$$

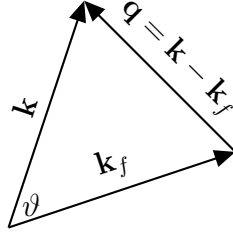
Mivel $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{r_0^2}} e^{iq_x x} = \sqrt{\pi} r_0 e^{-\frac{q_x^2 r_0^2}{4}}$, a hármasintegrál könnyen kiértékelhető:

$$f(\vartheta, \varphi) = -\frac{mV_0 r_0^3 \sqrt{\pi}}{2\hbar^2} e^{-\frac{q^2 r_0^2}{4}} \quad (7.176)$$

Innen:

$$\sigma(\vartheta, \varphi) = |f(\vartheta, \varphi)|^2 = \frac{m^2 V_0^2 r_0^6 \pi}{4\hbar^4} e^{-\frac{q^2 r_0^2}{2}}, \quad (7.177)$$

ahol a koszinusz tétel alapján $q^2 = 2k^2(1 - \cos(\vartheta))$:



Azaz valójában $f(\vartheta, \varphi) = f(\vartheta)$, így $\sigma(\vartheta, \varphi) = \sigma(\vartheta)$. A teljes hatáskeresztmetszet:

$$\sigma_{tot} = \int d\Omega \sigma(\Omega) = \int \underbrace{d\vartheta \sin \vartheta}_{d(\cos \vartheta)} \int d\varphi \sigma(\vartheta) = 2\pi \int d(\cos \vartheta) \sigma(\cos \vartheta) = \quad (7.178)$$

$$\frac{m^2 V_0^2 r_0^6 \pi^2}{2\hbar^4} \int_{-1}^1 dx e^{-r_0^2 k^2 (1-x)} = \frac{m^2 V_0^2 r_0^4 \pi^2}{2\hbar^4 k^2} (1 - e^{-2r_0^2 k^2}) \quad (7.179)$$

b) Az előző részben láttuk, hogy bár a potenciál gömbszimmetrikus volt, \mathbf{k} mégis kijelöl egy irányt, ami miatt csak hengersizmetria lesz, így $f = f(\vartheta)$ alakja (\mathbf{q} és \mathbf{r} szögét Θ -val jelölve) gömbszimmetrikus potenciál esetén:

$$f(\vartheta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int dr \int \underbrace{d\varphi}_{2\pi} \int \underbrace{\frac{d\Theta \sin \Theta}{d(\cos \Theta)}}_{\frac{\sin qr}{qr}} e^{iqr \cos \Theta} V(r) = \quad (7.180)$$

$$-\frac{m}{2\pi\hbar^2} 4\pi \int dr r^2 V(r) \frac{\sin qr}{qr} = -\frac{2m}{\hbar^2 q} 4\pi \int dr r V(r) \sin qr \quad (7.181)$$

Így $V(r) = V_0 e^{-\frac{r}{r_0}}$ -t helyettesítve:

$$f(\vartheta) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q} \int_0^{\infty} dr r e^{-\frac{r}{r_0}} \sin qr = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} \frac{2r_0^3}{(1 + q^2 r_0^2)^2} \quad (7.182)$$

$$\sigma(\vartheta) = -\frac{16m^2V_0^2r_0^6}{\hbar^4(1+q^2r_0^2)^4}, \quad (7.183)$$

ahol $q^2 = 2k^2(1 - \cos \vartheta)$. Ezt kiintegrálva:

$$\sigma_{tot} = -\frac{64\pi}{3} \left(\frac{mV_0r_0^3}{\hbar^2} \right)^2 \frac{16(kr_0)^4 + 12(kr_0)^2 + 3}{(1 + 4(kr_0)^2)^3} = \begin{cases} \left(\frac{8mV_0r_0^3}{\hbar^2} \right)^2 \pi, & \text{ha } kr_0 \rightarrow 0 \\ \left(\frac{16\pi}{3} \frac{mV_0r_0^2}{k\hbar^2} \right)^2 \pi, & \text{ha } kr_0 \gg 1 \end{cases} \quad (7.184)$$

c) Yukawa-potenciál esetén: $V(r) = \frac{\alpha}{r} e^{-\frac{r}{r_0}}$:

$$f(\vartheta) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2q} \int_0^\infty dr r e^{-\frac{r}{r_0}} \sin qr = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \frac{r_0^2}{1 + q^2r_0^2} \quad (7.185)$$

$$\sigma(\vartheta) = \frac{4m^2\alpha^2r_0^4}{\hbar^4(1 + q^2r_0^2)^2} \quad (7.186)$$

Az $r_0 \rightarrow \infty$ határesetben Coulomb-potenciált kapunk, ekkor figyelembe véve, hogy $E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$, illetve hogy $q^2 = 4k^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2}$ a $\sigma(\vartheta)$ kifejezése épp a Rutherford-szórási formulát adja:

$$\lim_{r_0 \rightarrow \infty} \sigma(\vartheta) = \frac{\alpha^2}{4E \sin^2 \frac{\vartheta}{2}} \quad (7.187)$$

A teljes hatáskeresztmetszet:

$$\sigma_{tot} = \frac{16m^2\alpha^2r_0^4\pi}{\hbar^4(1 + 4(kr_0)^2)} = \begin{cases} \left(\frac{4m\alpha r_0^2}{\hbar^2} \right)^2 \pi, & \text{ha } k \rightarrow 0 \\ \frac{4\pi}{k^2} \left(\frac{m\alpha r_0}{\hbar^2} \right)^2, & \text{ha } k \rightarrow \infty \end{cases} \quad (7.188)$$

d) Utoljára pedig tekintsük a puha golyót, ahol

$$V(r) = \begin{cases} V_0, & \text{ha } r < r_0 \\ 0, & \text{ha } r > r_0 \end{cases} \quad (7.189)$$

$$f(\vartheta) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2q} \int_0^{r_0} dr r \sin qr = -\frac{2mV_0}{\hbar^2q^3} (\sin qr_0 - qr_0 \cos qr_0) \quad (7.190)$$

$$\sigma(\vartheta) = \frac{4m^2V_0^2}{\hbar^4q^6} (\sin qr_0 - qr_0 \cos qr_0)^2 \quad (7.191)$$

Innen

$$\sigma_{tot} = \frac{2\pi}{k^2} \left(\frac{mV_0}{\hbar^2} \right)^2 (\sin qr_0 - qr_0 \cos qr_0)^2 \quad (7.192)$$

8. fejezet

Mozgás elektromágneses térben

8.1. Elmélet

8.1.1. A kinetikus impulzus csererelációi

Az elektromágneses tér klasszikus tárgyalásában bevezetjük a $\phi(\mathbf{r}, t)$ skalárpotenciált és az $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ vektorpotenciált, melyekből az \mathbf{E} elektromos térerősségvektor és \mathbf{B} mágneses indukcióvektor származtathatók,

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi, \quad (8.1)$$

és

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (8.2)$$

A klasszikus Hamilton-függvény *nem-relativisztikus közelítésben*,

$$H = \frac{(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2}{2m} + q\phi, \quad (8.3)$$

ahol \mathbf{p} az helykoordinátákhoz konjugált *kanonikus impulzus*. Célszerű bevezetni a \mathbf{K} *kinetikus impulzust*,

$$\mathbf{K} = \mathbf{p} - q\mathbf{A}, \quad (8.4)$$

mely a részecske \mathbf{v} sebességével $\mathbf{K} = m\mathbf{v}$ kapcsolatban áll.

A kvantummechanikai tárgyalás alapja a *kanonikus kvantálás*, mely szerint a helykoordinátához és a kanonikus impulzushoz rendelt operátorok az alábbi csererelációkat elégítik ki,

$$[p_i, x_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}. \quad (8.5)$$

Koordináta reprezentációban tehát megtartjuk a

$$\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (8.6)$$

definíciót és, a potenciáloknak megfelelő szorzásoperátorokat bevezetve, a kinetikus impulzus

$$\mathbf{K} = \frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}. \quad (8.7)$$

8.1. Tétel *A kinetikus impulzus operátorok felcserélési relációja,*

$$[K_i, K_j] = i\hbar q \varepsilon_{ijk} B_k . \quad (8.8)$$

Bizonyítás.

$$\begin{aligned} [K_i, K_j] &= i\hbar q ([\partial_i, A_j] + [A_i, \partial_j]) \\ &= i\hbar q (\partial_i A_j - A_j \partial_i + A_i \partial_j - \partial_j A_i) \\ &= i\hbar q \left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \right) = i\hbar q \varepsilon_{ijk} B_k . \end{aligned} \quad (8.9)$$

A fenti csererelációkat nyilvánvalóan átírhatjuk a

$$\mathbf{K} \times \mathbf{K} = i\hbar q \mathbf{B} , \quad (8.10)$$

alakban. A kinetikus impulzus és a koordináta operátorok felcserélési relációja:

$$[K_i, x_j] = [p_i, x_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} . \quad (8.11)$$

□

8.1.2. A Hamilton operátor

A következőkben a Hamilton-operátor alakját vizsgáljuk koordinátareprezentációban:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right)^2 + q\phi \quad (8.12)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + q\phi + \frac{i\hbar q}{2m} (\nabla \mathbf{A} + \mathbf{A} \nabla) + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2 . \quad (8.13)$$

A következő átalakítással,

$$\partial_i A_i + A_i \partial_i = \frac{\partial A_i}{\partial x_i} + 2A_i \partial_i \implies \nabla \mathbf{A} + \mathbf{A} \nabla = \operatorname{div} \mathbf{A} + 2\mathbf{A} \nabla , \quad (8.14)$$

és *Coulomb-mértéket* ($\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$) használva kapjuk az alábbi Hamilton-operátort,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + q\phi + \frac{i\hbar q}{m} \mathbf{A} \nabla + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2 , \quad (8.15)$$

mely az utolsó két additív tagban különbözik a szokásos (nem-relativisztikus) Hamilton-operátortól.

Paramágneses kölcsönhatás

Homogén (térben állandó nagyságú és irányú) mágneses tér esetén használjuk az ún. *szimmetrikus mértéket*,

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} . \quad (8.16)$$

Ekkor a (8.15) Hamilton-operátor harmadik tagja,

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar q}{m} \mathbf{A} \nabla &= \frac{i\hbar q}{2m} (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \nabla = \frac{i\hbar q}{2m} (\mathbf{r} \times \nabla) \mathbf{B} = -\frac{q}{2m} (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \mathbf{B} \\ &= -\frac{q}{2m} \mathbf{L} \mathbf{B} = -\mathbf{M}_L \mathbf{B}, \end{aligned} \quad (8.17)$$

alakra hozható, ahol a részecske *mágneses momentum* operátora,

$$\mathbf{M}_L = \frac{q}{2m} \mathbf{L} = -\mu_B \frac{\mathbf{L}}{\hbar}, \quad (8.18)$$

ahol elektronra $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9.27 \times 10^{-24}$ J/T a Bohr-magneton (e az elemi töltés, m az elektron tömege). A spin figyelembevételével az ún. *Pauli paramágneses tag*nak,

$$H_{para} = -(\mathbf{M}_L + 2\mathbf{M}_S) \mathbf{B} = \frac{\mu_B}{\hbar} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \mathbf{B}, \quad (8.19)$$

mellyel a *közönséges és anomális Zeemann effektus* magyarázható.

Diamágneses kölcsönhatás

A (8.15) Hamilton-operátor utolsó tagja,

$$\frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2 = \frac{q^2}{8m} (\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2 = \frac{q^2}{8m} (\mathbf{r}^2 \mathbf{B}^2 - (\mathbf{r} \mathbf{B})^2) = \frac{q^2 \mathbf{B}^2}{8m} (x^2 + y^2), \quad (8.20)$$

az ún. *Langevin diamágneses tag*, ahol az utolsó kifejezést z irányú mágneses tér esetében kapjuk. Ez a legtöbb esetben elhanyagolható a paramágneses járulékhöz képest: az atomi energiaszinteken fellépő diamágneses korrekció $10^{-14} B$ [T] nagyságrendű.

Vegyük észre, hogy a paramágneses járulék az elektron $\boldsymbol{\mu} = -\frac{\mu_B}{\hbar} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S})$ *permanens mágneses momentum*ának a mágneses indukció irányába való fordulása miatt lép föl. Ezzel szemben a Langevin-diamágnesség a mágneses tér hatására *indukált mágneses momentum*mal kapcsolatos,

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu}_{dia} &= -\frac{\partial E_{dia}}{\partial \mathbf{B}} = -\frac{e^2}{8m} \frac{\partial \langle (\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2 \rangle}{\partial \mathbf{B}} \\ &= -\frac{e^2}{4m} (\langle \mathbf{r}^2 \rangle \mathbf{B} - \langle \mathbf{r} (\mathbf{r} \mathbf{B}) \rangle) = -\frac{e^2 B}{4m} \langle x^2 + y^2 \rangle \mathbf{e}_z, \end{aligned} \quad (8.21)$$

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

$$\chi_{dia} = -\frac{e^2}{4m} (\langle \mathbf{r}^2 \rangle I - \langle \mathbf{r} \circ \mathbf{r} \rangle)$$

(ahol I a 3×3 -as egységmátrix), mellyel a következő kifejezéseket kapjuk:

$$\boldsymbol{\mu}_{dia} = \chi_{dia} \mathbf{B}$$

és

$$\delta E_{dia} = -\frac{1}{2} \mathbf{B} \boldsymbol{\mu}_{dia} = -\frac{1}{2} \mathbf{B} \chi_{dia} \mathbf{B}.$$

8.1.3. Kontinuitási egyenlet

Induljunk ki az általános

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}^2\psi + \frac{i\hbar q}{2m}(\nabla\mathbf{A} + \mathbf{A}\nabla)\psi + q\phi\psi \quad (8.22)$$

időfüggő Schrödinger-egyenletből. A fenti egyenletet konjugálva,

$$-i\hbar\partial_t\psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^* + \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}^2\psi^* - \frac{i\hbar q}{2m}(\nabla\mathbf{A} + \mathbf{A}\nabla)\psi^* + q\phi\psi^* , \quad (8.23)$$

majd az első egyenletet ψ^* -gal, a másodikat ψ -vel beszorozva és az így nyert két egyenletet egymásból kivonva kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} i\hbar(\psi^*\partial_t\psi + \psi\partial_t\psi^*) &= -\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*) \\ &+ \frac{i\hbar q}{2m}(\psi^*(\nabla\mathbf{A} + \mathbf{A}\nabla)\psi + \psi(\nabla\mathbf{A} + \mathbf{A}\nabla)\psi^*) . \end{aligned} \quad (8.24)$$

A fenti egyenlet mindkét oldalát teljes deriválttá alakítva,

$$\begin{aligned} \psi^*\partial_t\psi + \psi\partial_t\psi^* &= \partial_t(\psi^*\psi) , \\ \psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^* &= \nabla(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) , \\ \psi^*(\nabla\mathbf{A} + \mathbf{A}\nabla)\psi + \psi(\nabla\mathbf{A} + \mathbf{A}\nabla)\psi^* &= 2\nabla(\mathbf{A}\psi^*\psi) , \end{aligned}$$

jutunk a kontinuitási egyenlethez,

$$\partial_t\rho + \nabla\mathbf{j} = 0 , \quad (8.25)$$

ahol a megtalálási valószínűségi sűrűség,

$$\rho = \psi^*\psi , \quad (8.26)$$

és a valószínűségi áramsűrűség,

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi) - \frac{q}{m}\mathbf{A}\psi^*\psi . \quad (8.27)$$

Látható, hogy a valószínűségi sűrűség kifejezése megegyezik az elektromágneses tér (vektorpotenciál) nélkül levezetett eredménnyel, a valószínűségi áramsűrűségben viszont expliciten megjelenik a vektorpotenciál hatása. Ezt úgy tudjuk értelmezni, hogy az *áramsűrűséget* a sebesség tér- és időbeli eloszlásával azonosítjuk a ψ állapotban,

$$\mathbf{j} = \text{Re}(\psi^*\mathbf{v}\psi) = \frac{1}{m}\text{Re}(\psi^*\mathbf{K}\psi) = \frac{1}{m}\text{Re}(\psi^*\mathbf{p}\psi) - \frac{q}{m}\mathbf{A}\psi^*\psi , \quad (8.28)$$

ami nyilvánvalóan azonos a (8.27) kifejezéssel.

8.1.4. A hullámfüggvény mértéktranszformáció

A (8.1) elektromos térerősség és a (8.2) mágneses indukció az

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla\Lambda(\mathbf{r}, t) \quad \phi'(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}, t) - \partial_t\Lambda(\mathbf{r}, t) \quad (8.29)$$

mértéktranszformációval szemben invariáns. Az

$$i\hbar\partial_t\psi = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A} \right)^2 + q\phi \right] \psi \quad (8.30)$$

időfüggő Schrödinger-egyenlet a fenti mértéktranszformáció hatására a

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi' &= \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}' \right)^2 + q\phi' \right] \psi' \\ &= \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A} - q\nabla\Lambda \right)^2 + q\phi - q\partial_t\Lambda \right] \psi' \end{aligned} \quad (8.31)$$

alakú lesz.

8.2. Tétel Ha ψ a (8.30) egyenlet megoldása, akkor

$$\psi' = e^{\frac{iq}{\hbar}\Lambda} \psi \quad (8.32)$$

kielégíti a (8.31) egyenletet. Ezért ψ' -t a ψ hullámfüggvény mértéktranszformáltjának nevezzük.

Bizonyítás. Az

$$i\hbar\partial_t \left(e^{\frac{iq}{\hbar}\Lambda} \psi \right) = e^{\frac{iq}{\hbar}\Lambda} (i\hbar\partial_t - q\partial_t\Lambda) \psi \quad (8.33)$$

azonosságot behelyettesítve a (8.31) egyenletbe, majd némi átrendezés után kapjuk a következő egyenletet,

$$i\hbar\partial_t\psi = \left(\frac{1}{2m} e^{-\frac{iq}{\hbar}\Lambda} \left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A} - q\nabla\Lambda \right)^2 e^{\frac{iq}{\hbar}\Lambda} + q\phi \right) \psi. \quad (8.34)$$

Felhasználva az

$$e^{-\frac{i}{\hbar}f(\mathbf{r})} \left(\frac{\hbar}{i}\nabla + g(\mathbf{r}) - \nabla f(\mathbf{r}) \right) e^{\frac{i}{\hbar}f(\mathbf{r})} = \frac{\hbar}{i}\nabla + g(\mathbf{r}) \quad (8.35)$$

ill.

$$e^{-\frac{i}{\hbar}f(\mathbf{r})} \left(\frac{\hbar}{i}\nabla + g(\mathbf{r}) - \nabla f(\mathbf{r}) \right)^2 e^{\frac{i}{\hbar}f(\mathbf{r})} = \left(\frac{\hbar}{i}\nabla + g(\mathbf{r}) \right)^2 \quad (8.36)$$

azonosságokat, az $f(\mathbf{r}) = q\Lambda(\mathbf{r}, t)$ és $g(\mathbf{r}) = -q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ választással látható, hogy a (8.34) egyenlet identikus az (8.30) Schrödinger-egyenlettel. \square

8.3. Példa *Tekintsünk időben állandó tereket:*

$$\partial_t \Lambda(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \text{és} \quad \phi'(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) . \quad (8.37)$$

Valamely \mathbf{r}_0 referenciapontot választva, a mértéktranszformált vektorpotenciált kiintegrálhatjuk,

$$\int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}'(\mathbf{s}) d\mathbf{s} = \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{s}) d\mathbf{s} + \Lambda(\mathbf{r}) - \Lambda(\mathbf{r}_0) . \quad (8.38)$$

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

$$\Lambda(\mathbf{r}) = - \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{s}) d\mathbf{s} , \quad (8.39)$$

ahol a $\Lambda(\mathbf{r}_0) = 0$ integrálási konstans rögzítettük. Nyilvánvaló, hogy a fenti konstrukció csak rotációmentes vektorpotenciál (azaz zérus mágneses tér) esetén értelmes, hiszen ez biztosítja $\Lambda(\mathbf{r})$ egyértelműségét. Ezenfelül meg kell követelnünk, hogy a $\mathbf{B} = 0$ -val jellemzett tértartomány (jelöljük ezt Ω_0 -lal) egyszeresen összefüggő. Ha ugyanis Ω_0 körbefog egy olyan Ω_B tértartományt, ahol $\mathbf{B} \neq 0$, akkor $\Lambda(\mathbf{r})$ csak a körbeölelt fluxus,

$$\Phi_B = \oint \mathbf{A}(\mathbf{s}) d\mathbf{s} \quad (8.40)$$

egész-számszorosáig meghatározott. Legyen $\mathbf{r} \in \Omega_0$ esetén a vektorpotenciál $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, a hullámfüggvényt pedig jelöljük $\psi_B(\mathbf{r}, t)$ -vel. Amennyiben a mágneses tér az Ω_B tartományban (tehát mindenütt) zérus, a vektorpotenciál zérusnak választható, a hullámfüggvény pedig legyen $\psi_0(\mathbf{r}, t)$. Ekkor a hullámfüggvények között fennállnak a

$$\psi_0(\mathbf{r}, t) = e^{\frac{iq}{\hbar} \Lambda(\mathbf{r})} \psi_B(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{iq}{\hbar} \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{s}) d\mathbf{s}} \psi_B(\mathbf{r}, t) , \quad (8.41)$$

illetve a

$$\psi_B(\mathbf{r}, t) = e^{\frac{iq}{\hbar} \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{s}) d\mathbf{s}} \psi_0(\mathbf{r}, t) , \quad (8.42)$$

összefüggések.

8.1.5. Mozgás homogén mágneses térben: a Landau nívók

Homogén mágneses térben egy töltött részecske a térre merőleges síkban

$$\omega_c = \frac{|q| B}{m} \quad (8.43)$$

ún. ciklotron (kör)frekvenciával körmozgást végez. A Bohr-Sommerfeld kvantálási feltétel alapján,

$$\oint L_z d\varphi = 2\pi m R^2 \omega_c = \hbar n \quad (n = 1, 2, \dots) , \quad (8.44)$$

a részecske a harmonikus oszcillátorhoz hasonló kvantált energianívókkal rendelkezik:

$$E_n = \frac{1}{2}mR^2\omega_c^2 = \frac{1}{2}n\hbar\omega_c. \quad (8.45)$$

A kvantummechanikai tárgyalásban vegyük fel koordinátarendszerünk z tengelyét \mathbf{B} irányában: $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. Szimmetrikus mértéket használva a vektorpotenciál

$$\mathbf{A} = \left(-\frac{1}{2}By, \frac{1}{2}Bx, 0 \right), \quad (8.46)$$

a kinetikus impulzus pedig

$$\mathbf{K} = (K_x, K_y, K_z) = \left(p_x - \frac{eB}{2}y, p_y + \frac{eB}{2}x, p_z \right) \quad (8.47)$$

$$= \left(p_x - \frac{m\omega_c}{2}y, p_y + \frac{m\omega_c}{2}x, p_z \right) \quad (8.48)$$

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

$$[K_x, K_y] = i\hbar eB = \frac{\hbar}{i}m\omega_c \quad (8.49)$$

cserereláció. A

$$H = \frac{1}{2m} (K_x^2 + K_y^2) + \frac{p_z^2}{2m} \quad (8.50)$$

Hamilton operátor sajátfüggvényei,

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi_k(x, y) e^{ikz} \quad (8.51)$$

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

$$\frac{1}{2m} (K_x^2 + K_y^2) \varphi_k(x, y) = \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \varphi_k(x, y) \quad (8.52)$$

sajátértékegyenletet. Bevezetve az

$$X = \frac{K_y}{eB} = \frac{K_y}{m\omega_c} \quad \text{és} \quad P = K_x \quad (8.53)$$

operátorokat, a (8.49) csererelációból egyrészt következik, hogy

$$[P, X] = \frac{\hbar}{i}, \quad (8.54)$$

másrészt pedig (8.52) egyenlet a

$$\left(\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_c^2 X^2 \right) \varphi_k(x, y) = \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \varphi_k(x, y) \quad (8.55)$$

oszcillátor egyenletbe megy át. A harmonikus oszcillátorra alkalmazott algebrai megoldás (lásd: 2.1.4 fejezet) alapján bevezethetjük az

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}L_H} \left(X + \frac{i}{m\omega_c} P \right) \quad (8.56)$$

és

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}L_H} \left(X - \frac{i}{m\omega_c} P \right) \quad (8.57)$$

léptetőoperátorokat, ahol

$$L_H = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_c}} = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} = \frac{25.66}{\sqrt{B [T]}} \text{nm} \quad (8.58)$$

az ún. mágneses hossz. Szokványos terek esetén a mágneses hossz több nagyságrenddel nagyobb az atomi távolságoknál. A Hamilton-operátor nyilvánvalóan a

$$H = \frac{1}{2}m\omega_c^2 X^2 + \frac{P^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} = \hbar\omega_c \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m} \quad (8.59)$$

alakot ölti. Következésképpen a sajátenergiák,

$$E = E_{n,k} = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (8.60)$$

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

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

$$\mathbf{A} = (-By, 0, 0) \quad , \quad (8.61)$$

is. A megoldás

$$\psi_{n,k_x,k_z}(x,y,z) \sim \exp(ik_z z) \exp(ik_x x) \exp\left(-\frac{1}{2L_H^2}(y - k_x L_H^2)^2\right) H_n\left(\frac{y - k_x L_H^2}{L_H}\right) \quad , \quad (8.62)$$

alakú, ahol H_n Hermite-polinom. Innen is látható, hogy a hullámfüggvény karakterisztikus kiterjedése az y irányban L_H .

Tekintsünk egy z irányban igen vékony mintát úgy, hogy k_z csak zérus értékű lehet. Az elektron energiája nem függ a k_x kvantumszámtól, ezért a *Landau-nívók elfajultak*. Ha a kétdimenziós mintánk véges (L_x, L_y) kiterjedésű, akkor k_x lehetséges értékei,

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} m \quad (m \in \mathbb{N}) \quad . \quad (8.63)$$

Mivel y irányban a Landau-pályák $k_x L_H^2$ távolságban helyezkednek el egymástól, a Landau-nívók M degeneráltságát az határozza meg, hogy mekkora k_x maximális értéke:

$$L_H^2 \underbrace{\frac{2\pi}{L_x} M}_{\max k_x} = L_y \implies M = \frac{L_x L_y}{2\pi L_H^2} = \frac{ABe}{h} = \frac{\Phi}{\Phi_0} \quad , \quad (8.64)$$

ahol $A = L_x L_y$ a minta felülete, $\Phi = AB$ a mágneses indukció fluxusa a mintán és $\Phi_0 = \frac{h}{e}$ az elemi fluxus. Ezt úgy is megfogalmazhatjuk, hogy egy Landau-pálya egy elemi fluxust képvisel és a mintában kialakuló Landau-pályák száma a fluxussal egyenes arányban nő.

8.2. Feladatok

8.2.1. Példák

8.1. Feladat Szimmetrikus mértéket használva mutassa meg, hogy a homogén, z -irányú mágneses térben mozgó szabad részecske Hamilton-operátora felcserélhető az impulzusmomentum operátor z -komponensével!

Segítség: $\mathbf{A} = \left(-\frac{By}{2}, \frac{Bx}{2}, 0\right)$

8.2. Feladat Határozza meg az \mathbf{L} impulzusmomentum operátor kvantummechanikai időderiváltját a

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\mu_B}{\hbar} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B}$$

Hamilton operátorral jellemzett rendszerben, ahol \mathbf{B} egy konstans mágneses indukció! Mikor lesz \mathbf{L} mozgásállandó?

8.3. Feladat Bizonyítsa be, hogy a

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t)) - \frac{q}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t)$$

valószínűségi áramsűrűség invariáns a

$$\Psi'(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, t) \exp\left(\frac{iq}{\hbar c} \Lambda(\mathbf{r}, t)\right)$$

mértéktranszformációra!

8.4. Feladat Határozzuk meg a

$$H = 2\frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \quad (s = \pm \frac{1}{2}) \quad (8.65)$$

Hamilton-operátor sajátértékeit és sajátállapotait \mathbf{B} tetszőleges iránya esetén!

8.5. Feladat Tegyük fel, hogy ismerjük a

$$(H_0 + \mu_B \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \psi = E \psi$$

stacionárius Pauli-Schrödinger egyenlet megoldását, ahol H_0 diagonális a spinvátozóknak és \mathbf{B} egy homogén (kicszerelődési) mágneses tér. Forgassuk el a mágneses teret \mathbf{n} tengely körül φ szöggel, $\mathbf{B}' = R(\varphi, \mathbf{n}) \mathbf{B}$! Lássuk be, hogy ekkor a Pauli-Schrödinger-egyenlet megoldása

$$\psi' = U(\varphi, \mathbf{n}) \psi ,$$

ahol

$$U(\varphi, \mathbf{n}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varphi \mathbf{S} \cdot \mathbf{n}\right) = \exp\left(-i \frac{\varphi}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}\right) .$$

Segítség: Vizsgáljuk meg hogyan változik \mathbf{B} egy kis $\Delta\varphi$ szögű forgatásra. A megoldásban használjuk ki, hogy σ vektoroperátor, azaz

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k .$$

8.6. Feladat Oldjuk meg a homogén, z irányú mágneses térbe helyezett háromdimenziós harmonikus oszcillátor sajátértékproblémáját!

Segítség: Használjon szimmetrikus mértéket, $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(-By, Bx, 0)$, és bizonyítsa be, hogy a Hamilton operátor felcserélhető L_z -vel! Írja fel a teljes Hamilton-operátort a harmonikus oszcillátor léptető operátoraival, és diagonalizálja L_z mátrixát az $x - y$ altérben.

8.7. Feladat Tekintsünk egy kétdimenziós periódikus potenciálban mozgó q töltésű részecske Hamilton operátorát homogén, a síkra merőleges mágneses térben

$$H = \frac{1}{2m} (K_x^2 + K_y^2) + q\phi(x, y) \quad , \quad (8.66)$$

ahol, amennyiben az elemi cella egy a és b oldalú téglalap,

$$\phi(x + na, y + mb) = \phi(x, y) \quad (n, m \in \mathbb{Z}) \quad , \quad (8.67)$$

és a $(-By, 0, 0)$ Landau mértékben

$$K_x = p_x + qBy \quad , \quad K_y = p_y \quad . \quad (8.68)$$

Bizonyítsuk be, hogy egy elemi cellára eső fluxus csakis a $\Phi_0 = h/q$ elemi fluxus egészszámu többszöröse lehet.

Segítség: Defináljuk az

$$X(a) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}aK_x\right) \quad Y(b) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}bK_y\right) \quad (8.69)$$

operátorokat, mutassuk meg hogy felcserélhetőek a Hamilton-operátorral! Használjuk az 1.3. feladatban bizonyított Baker-Campbell-Hausdorff formulát:

$$\exp(A + B) = \exp(A)\exp(B)\exp\left(-\frac{1}{2}[A, B]\right) \quad (8.70)$$

8.8. Feladat Oldjuk meg a homogén, z irányú mágneses térben mozgó szabad elektron sajátértékproblémáját az $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$ valamint az $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ Landau-mértékeket használva! Milyen (unitér) transzformáció köti össze a két sajátfüggvény rendszert?

8.9. Feladat A körpálya középpontjának klasszikus értelmezése alapján konstruáljuk meg a Landau-szinteken belül léptető operátorokat!

8.10. Feladat Egy egydimenziós harmonikus oszcillátor alapállapotban van. A $t = 0$ pillanatban homogén elektromos teret kapcsolunk be. Határozzuk meg az időfüggő hullámfüggvényt a bekapcsolás után!

Segítség: Alakítsuk a potenciált teljes négyzetté, majd vezessünk x irányban eltolt keltő és eltüntető operátorokat. Használjuk ki, hogy a rendszer $t = 0$ -ban az alapállapotban volt!

8.2.2. Megoldások

8.1 Megoldás A Hamilton-operátor alakja a következő:

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_x + \frac{e}{2} B y \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(p_y - \frac{e}{2} B x \right)^2 + \frac{1}{2m} p_z^2 \quad (8.71)$$

Bevezetve az $\omega = \frac{eB}{2m}$ Larmor-frekvenciát átrendezés után:

$$\frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \frac{e^2 B^2}{8m} (x^2 + y^2) + \frac{eB}{4m} (y p_x - x p_y) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2) - \frac{1}{2} \omega L_z \quad (8.72)$$

Látható, hogy az első két tag egy $x - y$ síkban fekvő harmonikus oszcillátort ír le, feladatunk az, hogy erről a tagról mutassuk meg, hogy kommutál L_z -vel, hiszen az utolsó tag nyilvánvalóan kommutál. Ehhez két megoldást is adunk:

- Írjuk át a Hamilton-operátor első két tagját gömbi koordinátákba:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \sin^2 \vartheta = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right) + \frac{L^2}{2mr^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \sin^2 \vartheta \quad (8.73)$$

Mivel $L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$, a fenti képletben pedig semmi sem függ φ -től, valamint $[L^2, L_z] = 0$, nyilvánvaló, hogy $[H, L_z] = 0$

- Írjuk fel H_0 -t a harmonikus oszcillátor keltő és eltüntető operátoraival:

$$H_0 = \frac{1}{2m} p_z^2 + \hbar \omega (a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + 1) \quad (8.74)$$

Mivel $[p_z^2, L_z] = 0$, a léptető-operátorok kommutációs relációi és a 3.6. feladat eredménye alapján belátható, hogy $[H_0, L_z] = 0$

8.2 Megoldás

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, \mathbf{L}], \quad (8.75)$$

tehát feladatunk a $[H, \mathbf{L}]$ kiszámítása, melyet tagonként végzünk:

$$[H, \mathbf{L}] = \left[\frac{p^2}{2m}, \mathbf{L} \right] + [V(\mathbf{r}), \mathbf{L}] + \left[\frac{\mu_B}{\hbar} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \mathbf{B}, \mathbf{L} \right] \quad (8.76)$$

$$\left[\frac{p^2}{2m}, L_i \right] = \frac{1}{2m} [p_\ell p_\ell, L_i] = \frac{1}{2m} (p_\ell [p_\ell, L_i] + [p_\ell, L_i] p_\ell) = 0, \quad (8.77)$$

mivel

$$p_\ell [p_\ell, L_i] = p_\ell \varepsilon_{ijk} [p_\ell, x_j p_k] = p_\ell \frac{\hbar}{i} \varepsilon_{ilk} p_k = \frac{\hbar}{i} \varepsilon_{ilk} p_\ell p_k = 0 \quad (8.78)$$

A második tag a következő alakot ölti:

$$[V(\mathbf{r}), L_i] = \varepsilon_{ijk} [V(\mathbf{r}), x_j p_k] = \varepsilon_{ijk} \left(x_j \underbrace{[V(\mathbf{r}), p_k]}_{-\frac{\hbar}{i} \partial_k V(\mathbf{r})} + \underbrace{[V(\mathbf{r}), x_j]}_0 p_k \right) = i\hbar (\mathbf{r} \times \nabla V(\mathbf{r}))_i \quad (8.79)$$

Az utolsó tag két része:

$$\frac{\mu_B}{\hbar} [\mathbf{L}\mathbf{B}, L_i] = \frac{\mu_B}{\hbar} [L_k B_k, L_i] = \frac{\mu_B}{\hbar} \left(L_k \underbrace{[B_k, L_i]}_0 + \underbrace{[L_k, L_i] B_k}_{i\hbar\epsilon_{kil} L_\ell B_k} \right) = \frac{\mu_B}{\hbar} i\hbar (\mathbf{L} \times \mathbf{B})_i \quad (8.80)$$

$$\frac{2\mu_B}{\hbar} [\mathbf{S}\mathbf{B}, L_i] = \frac{2\mu_B}{\hbar} [S_k B_k, L_i] = 0 \quad (8.81)$$

Tehát az eredmény:

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left(i\hbar (\mathbf{r} \times \nabla V(\mathbf{r})) + \frac{\mu_B}{\hbar} i\hbar (\mathbf{L} \times \mathbf{B}) \right) = -(\mathbf{r} \times \nabla V(\mathbf{r})) - \frac{\mu_B}{\hbar} (\mathbf{L} \times \mathbf{B}) \quad (8.82)$$

Centrális potenciál esetén az első tag eltűnik, ekkor $\mathbf{L} \parallel \mathbf{B}$ esetén $d\mathbf{L}/dt = 0$, vagyis \mathbf{L} mozgásállandó.

8.3 Megoldás Mértéktranszformáció hatására:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi'(\mathbf{r}, t) e^{-\frac{iq}{\hbar} \Lambda(\mathbf{r}, t)} \quad \mathbf{A} = \mathbf{A}' - \nabla \Lambda(\mathbf{r}, t) \quad (8.83)$$

Az áramsűrűségben szereplő tagok:

$$\nabla \Psi = \nabla \Psi' e^{-\frac{iq}{\hbar} \Lambda} - \frac{iq}{\hbar} \Psi' \nabla \Lambda e^{-\frac{iq}{\hbar} \Lambda} \quad (8.84)$$

$$\nabla \Psi^* = \nabla \Psi'^* e^{\frac{iq}{\hbar} \Lambda} + \frac{iq}{\hbar} \Psi'^* \nabla \Lambda e^{\frac{iq}{\hbar} \Lambda} \quad (8.85)$$

Azaz

$$\Psi \nabla \Psi^* = \Psi' \nabla \Psi'^* + \frac{iq}{\hbar} |\Psi'|^2 \nabla \Lambda \quad (8.86)$$

$$\Psi^* \nabla \Psi = \Psi'^* \nabla \Psi' - \frac{iq}{\hbar} |\Psi'|^2 \nabla \Lambda \quad (8.87)$$

Innen

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) - \frac{q}{m} \mathbf{A} |\Psi|^2 = \quad (8.88)$$

$$\frac{i\hbar}{2m} (\Psi' \nabla \Psi'^* - \Psi'^* \nabla \Psi') + \frac{i\hbar}{2m} \frac{2iq}{\hbar} |\Psi'|^2 \nabla \Lambda - \frac{q}{m} \mathbf{A}' |\Psi'|^2 + \frac{q}{m} \nabla \Lambda |\Psi'|^2 \quad (8.89)$$

8.4 Megoldás Írjuk fel \mathbf{B} -t és \mathbf{S} -t a következő alakban:

$$\mathbf{B} = B\mathbf{n} \quad \mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}, \quad (8.90)$$

ahol \mathbf{n} egységvektor, σ_i pedig az i -edik Pauli-mátrix. A Hamilton-operátor alakja:

$$H = 2\frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{S}\mathbf{B} = \mu_B B \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n} \quad (8.91)$$

Vagyis a $\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}$ mátrix sajátértékeit és sajátvektorait kell meghatároznunk. Ekkor \mathbf{n} -et gömbi-koordinátákban felírva ($\mathbf{n} = (\sin \vartheta \cos \varphi, \sin \vartheta \sin \varphi, \cos \vartheta)$):

$$\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n} = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ \sin \vartheta e^{i\varphi} & -\cos \vartheta \end{pmatrix} \quad (8.92)$$

Ennek sajátértékei és sajátvektorai:

$$\lambda = 1 \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} \frac{\cos \vartheta + 1}{\sin \vartheta} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (8.93)$$

$$\lambda = -1 \quad |-1\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} \frac{\cos \vartheta - 1}{\sin \vartheta} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (8.94)$$

Azaz a Hamilton-operátor sajátértékei $\varepsilon_{12} = \pm \mu_B B$, sajátvektorai pedig a $|\pm 1\rangle$ vektorok.

8.5 Megoldás Forgassuk el a \mathbf{B} vektort egy $\Delta\varphi$ kis szöggel:

$$B'_i = B_i + (\mathbf{n} \times \mathbf{B})_i \Delta\varphi \quad (8.95)$$

Ekkor a $B'_i \sigma_i$ szorzat a következő alakba írható:

$$B'_i \sigma_i = B_i \sigma_i + \varepsilon_{ijk} n_j B_k \sigma_i \Delta\varphi = B_i \sigma_i - B_i \varepsilon_{ijk} n_j \sigma_k \Delta\varphi = B_i \sigma'_i \quad (8.96)$$

Vagyis \mathbf{B} valós térbeli elforgatása felfogható egy spintérbeli $\sigma \rightarrow \sigma'$ transzformációnak is. Vizsgáljuk meg ezen spintérbeli transzformációt első rendig $\Delta\varphi$ -ben:

$$\sigma'_i = \sigma_i - \underbrace{\varepsilon_{ijk} \sigma_k}_{-\frac{i}{2}[\sigma_i, \sigma_j]} n_j \Delta\varphi = \sigma_i + \frac{i}{2} \sigma_i \sigma_j n_j \Delta\varphi - \frac{i}{2} \sigma_j n_j \sigma_i \Delta\varphi = \quad (8.97)$$

$$= \left(I - \frac{i}{2} \sigma_j n_j \Delta\varphi \right) \sigma_i \left(I + \frac{i}{2} \sigma_j n_j \Delta\varphi \right) \quad (8.98)$$

Belátható, hogy véges φ szöggel való forgatás esetén a zárójelben álló kifejezések helyére a megfelelő exponenciális függvényt kell írni:

$$\sigma' = e^{-\frac{i}{2} \sigma \mathbf{n} \varphi} \sigma e^{\frac{i}{2} \sigma \mathbf{n} \varphi} = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{S} \mathbf{n} \varphi} \sigma e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{S} \mathbf{n} \varphi} = U \sigma U^{-1}, \quad (8.99)$$

ahol $U = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{S} \mathbf{n} \varphi}$. Világos, hogy ekkor

$$\psi' = U \psi = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{S} \mathbf{n} \varphi} \psi \quad (8.100)$$

8.6 Megoldás

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 (x^2 + y^2 + z^2) = \quad (8.101)$$

$$\frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 z^2 + \underbrace{\frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + \left(\frac{B^2 e^2}{8m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \right) (x^2 + y^2)}_{H_{xy}} - \frac{eB}{2m} \underbrace{xp_y - yp_x}_{L_z} \quad (8.102)$$

Bevezetve az $\omega_c = \frac{eB}{m}$ és az $\omega_1^2 = \omega_0^2 + \frac{\omega_c^2}{4}$ jelöléseket, valamint a harmonikus oszcillátor keltő és eltüntető operátorait, illetve felhasználva a 3.6. feladat eredményét:

$$H = \hbar \omega_0 \left(a_z^\dagger a_z + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_1 (a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + 1) - \frac{\hbar \omega_c}{2i} (a_x^\dagger a_y + a_y^\dagger a_x) \quad (8.103)$$

Világos, hogy L_z felcserélhető az első taggal, hiszen L_z x és y -től függő operátorokból áll, míg a Hamiltoni első tagja csak z -től függ. Az utolsó tag L_z -vel arányos, így ezzel is

kommutál. A középső H_{xy} tagról pedig egyszerűen megmutatható, hogy szintén kommutál L_z -vel, emiatt létezik közös sajátbázisa H_{xy} -nak és L_z -nek. H_{xy} spektruma degenerált, minden $N = n_x + n_y$ esetben $N + 1$ -szeres a degeneráció. Várható tehát, hogy L_z ezt a degenerációt hasítja fel, diagonalizáljuk L_z mátrixát egy adott N -hez tartozó altéren! Csak két mátrixelem nem zérus:

$$\langle n_x + 1, n_y - 1 | a_x^+ a_y | n_x, n_y \rangle = \sqrt{n_y} \sqrt{n_x + 1} \quad \langle n_x - 1, n_y + 1 | a_y^+ a_x | n_x, n_y \rangle = \sqrt{n_x} \sqrt{n_y + 1} \quad (8.104)$$

n_x, n_y és $N = n_x + n_y$ helyére vezessük be az ℓ és m kvantumszámokat:

$$\ell := \frac{n_x + n_y}{2} \quad m := \frac{n_x - n_y}{2} \quad (8.105)$$

$$n_x = \ell + m \quad n_y = \ell - m \quad N = 2\ell \quad (8.106)$$

Tehát a mátrixelemek az L_+ és L_- impulzusoperátor léptető operátorok sajátértékei:

$$\sqrt{n_y} \sqrt{n_x + 1} = \sqrt{(\ell - m)(\ell + m + 1)} = \sqrt{\ell(\ell + 1) - m(m + 1)} \quad (8.107)$$

$$\sqrt{n_x} \sqrt{n_y + 1} = \sqrt{(\ell + m)(\ell - m + 1)} = \sqrt{\ell(\ell + 1) - m(m - 1)} \quad (8.108)$$

Innen

$$\langle m' | L_z | m \rangle = \frac{\hbar}{i} \langle m' | L_+ + L_- | m \rangle = \frac{\hbar}{i} \langle m' | 2L_y | m \rangle \quad (8.109)$$

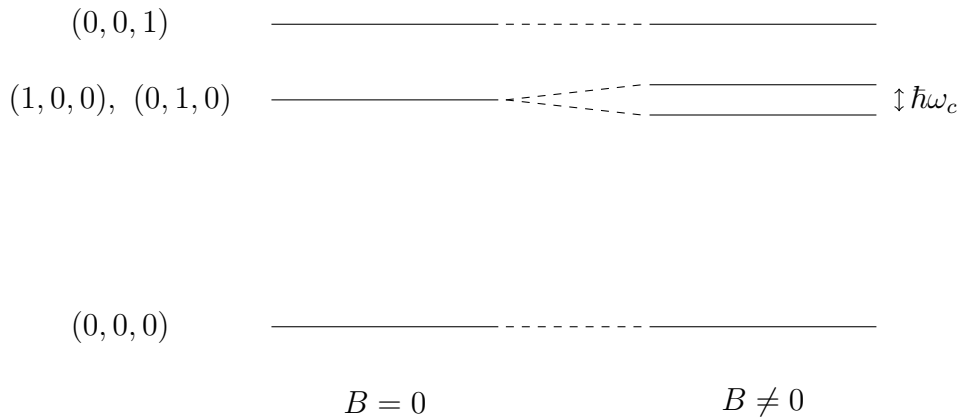
Tehát H_{xy} egy degenerált alterében L_z mátrixelemei épp $2L_y$ mátrixelemeinek felelnek meg az új ℓ és m kvantumszámokban. Az L_z mátrixának $\hbar m_z$ sajátértékei tehát

$$\hbar m_z = 2\hbar m_y, \quad \text{ahol} \quad m_y = -\ell, \dots, \ell = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} \quad (8.110)$$

A teljes Hamiltoni sajátértékei tehát:

$$E_{n_z, N, m_z} = \hbar\omega_0 \left(n_z + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_1 (N + 1) - \frac{e\hbar}{2m} B m_z \quad (8.111)$$

$$n_z = 0, 1, 2, \dots \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad m_z = -\frac{N}{2} \dots \frac{N}{2} \quad (8.112)$$



8.7 Megoldás *Definiáljuk a*

$$X(a) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} a K_x\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} a p_x\right) \exp\left(\frac{iq}{\hbar} B a y\right) \quad (8.113)$$

és az

$$Y(b) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}bK_y\right) \quad (8.114)$$

transzlációs operátorokat. Egyrészt

$$[K_x, K_y^2] = [K_x, K_y]K_y - K_y[K_x, K_y] = -\frac{\hbar q B}{i}(K_y - K_y) = 0 \quad (8.115)$$

és ugyanígy

$$[K_y, K_x^2] = 0 \quad , \quad (8.116)$$

ezért

$$[X(a), K_y^2] = [Y(b), K_x^2] = 0 \quad . \quad (8.117)$$

Másrészt

$$\begin{aligned} X(a)\phi(x, y)\psi(x, y) &= \exp\left(\frac{iq}{\hbar}Bay\right)\phi(x+a, y)\psi(x+a, y) = \\ &= \exp\left(\frac{iq}{\hbar}Bay\right)\phi(x, y)\psi(x+a, y) \end{aligned} \quad (8.118)$$

illetve

$$\phi(x, y)X(a)\psi(x, y) = \exp\left(\frac{iq}{\hbar}Bay\right)\phi(x, y)\psi(x+a, y) \quad , \quad (8.119)$$

következésképpen

$$[X(a), \phi] = [Y(b), \phi] = 0 \quad . \quad (8.120)$$

A fentiekből nyilvánvalóan következik, hogy

$$[X(a), H] = [Y(b), H] = 0 \quad . \quad (8.121)$$

H sajátfüggvényei ezért nyilvánvalóan $X(a)$ és $Y(b)$ sajátfüggvényei is,

$$H\psi = E\psi \implies X(a)\psi = x(a)\psi \quad , \quad Y(b)\psi = y(b)\psi \quad , \quad (8.122)$$

$$x(a) = \exp(ik_x a) \quad -\frac{\pi}{a} \leq k_x \leq \frac{\pi}{a} \quad , \quad (8.123)$$

$$y(b) = \exp(ik_y b) \quad -\frac{\pi}{b} \leq k_y \leq \frac{\pi}{b} \quad , \quad (8.124)$$

ezért

$$X(a)Y(b)\psi = x(a)y(b)\psi = Y(b)X(a)\psi \quad . \quad (8.125)$$

Ugyanakkor

$$\begin{aligned} (Y(b)X(a)\psi)(x, y) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}bp_y\right)\exp\left(\frac{iq}{\hbar c}Bay\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}ap_x\right)\psi(x, y) \\ &= \exp\left(\frac{iq}{\hbar}Ba(y+b)\right)\psi(x+a, y+b) \end{aligned} \quad (8.126)$$

és

$$(X(a)Y(b)\psi)(x,y) = \exp\left(\frac{iq}{\hbar}Bay\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar}ap_x\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar}bp_y\right) \psi(x,y) \\ \exp\left(\frac{iq}{\hbar}Bay\right) \psi(x+a, y+b) \quad , \quad (8.127)$$

$X(a)$ és $Y(b)$ felcserélhetősége miatt azonban

$$\exp\left(2\pi i \frac{\Phi}{\Phi_0}\right) = 1 \quad (8.128)$$

ahol

$$\Phi = abB \quad \text{és} \quad \Phi_0 = \frac{h}{q} \quad . \quad (8.129)$$

tehát

$$\frac{\Phi}{\Phi_0} = n \quad (n \in \mathbb{N}) \quad . \quad (8.130)$$

8.8 Megoldás

$$\mathbf{A} = (-By, 0, 0) \quad (8.131)$$

Egyszerű átalakítások után a Schrödinger-egyenlet a következő alakot ölti ($q = -e$):

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(i\partial_x + \frac{eB}{\hbar}y \right)^2 - (\partial_y^2 + \partial_z^2) \right] \psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \quad (8.132)$$

ansatz:

$$\psi(x,y,z) = \exp(ik_z z) \exp(ik_x x) \varphi(y) \quad (8.133)$$

Behelyettesítés után:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{eB}{\hbar}y - k_x \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \partial_y^2 \right] \varphi(y) = \left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) \varphi(y) \quad (8.134)$$

Felhasználva, hogy $\omega_c = eB/mc$ és $L_H = \sqrt{\hbar/m\omega_c} = \sqrt{\hbar c/eB}$, az

$$\left(\frac{1}{2}m\omega_c^2 (y - y_0)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \partial_y^2 \right) \varphi(y) = \left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) \varphi(y) \quad (8.135)$$

oszcillátoregyenletet kapjuk, ahol $y_0 = k_x L_H^2$. Következésképpen a sajátértékek és sajátfüggvények:

$$E_{n,k_x,k_z} = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 \quad (8.136)$$

$$\psi_{n,k_x,k_z}(x,y,z) = N_n \exp(ik_z z) \exp(ik_x x) \frac{1}{\sqrt{L_H}} \exp\left(-\frac{1}{2L_H^2} (y - k_x L_H^2)^2\right) H_n\left(\frac{y - k_x L_H^2}{L_H}\right) \quad . \quad (8.137)$$

ahol $N_n = (2^n n! \sqrt{\pi})^{-1/2}$ a normálási együttható.

Ugyanígy a

$$\mathbf{A}' = (0, Bx, 0) \quad (8.138)$$

vektorpotenciállal:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(i\partial_y - \frac{eB}{\hbar c} x \right)^2 - (\partial_x^2 + \partial_z^2) \right] \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (8.139)$$

$$\psi(x, y, z) = \exp(ik_z z) \exp(ik_y y) \varphi(x) \quad (8.140)$$

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{eB}{\hbar c} x + k_y \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \right] \varphi(x) = \left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) \varphi(x) \quad (8.141)$$

$$\left(\frac{1}{2} m \omega_c^2 (x - x_0)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \right) \varphi(x) = \left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) \varphi(x) \quad (8.142)$$

oszcillátoregyenletet kapjuk, ahol $x_0 = -k_y L_H^2$. Következésképpen a sajátértékek és sajátfüggvények:

$$E_{n, k_y, k_z} = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 \quad (8.143)$$

$$\psi'_{n, k_y, k_z}(x, y, z) = N_n \exp(ik_z z) \exp(ik_y y) \frac{1}{\sqrt{L_H}} \exp\left(-\frac{1}{2L_H^2} (x + k_y L_H^2)^2\right) H_n\left(\frac{x + k_y L_H^2}{L_H}\right) \quad (8.144)$$

A két mérték között áttérhetünk egy mértéktranszformációval, ami a hullámfüggvényre nézve egy unitér transzformációt jelent:

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \Lambda \quad (8.145)$$

$$\Lambda(\mathbf{r}) = Bxy \quad (8.146)$$

Ekkor fenn kell, hogy álljon:

$$\int dk_y c_{n, k_x, k_y} \psi'_{n, k_y, k_z}(\mathbf{r}) = \psi_{n, k_x, k_z}(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{ie}{c\hbar} \Lambda(\mathbf{r})\right) \quad (8.147)$$

azaz

$$c_{n, k_x, k_y} = \int d^3r \psi'_{n, k_y, k_z}(\mathbf{r})^* \exp\left(-\frac{ie}{c\hbar} \Lambda(\mathbf{r})\right) \psi_{n, k_x, k_z}(\mathbf{r}) \quad (8.148)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{N_n^2}{L_H} \int \int dx dy \exp(-ik_y y + ik_x x - ixy/L_H^2) \\ &\exp\left(-\frac{1}{2L_H^2} (x + k_y L_H^2)^2\right) H_n\left(\frac{x + k_y L_H^2}{L_H}\right) \\ &\exp\left(-\frac{1}{2L_H^2} (y - k_x L_H^2)^2\right) H_n\left(\frac{y - k_x L_H^2}{L_H}\right) \end{aligned} \quad (8.149)$$

Bevezetve az $\xi_x = x/L_H$, $\xi_y = y/L_H$, $q_x = k_x L_H$, valamint $q_y = k_y L_H$ változókat

$$\begin{aligned}
c_{n,k_x,k_y} &= N_n^2 L_H \int \int d\xi_x d\xi_y \exp(-iq_y \xi_y + iq_x \xi_x - i\xi_x \xi_y) \\
&\quad \exp\left(-\frac{1}{2}(\xi_x + q_y)^2 - \frac{1}{2}(\xi_y - q_x)^2\right) H_n(\xi_x + q_y) H_n(\xi_y - q_x) \\
&= N_n^2 L_H^2 \int \int d\xi_x d\xi_y \exp(-iq_y(\xi_y + q_x) + iq_x(\xi_x - q_y) - i(\xi_x - q_y)(\xi_y + q_x)) \\
&\quad \exp\left(-\frac{1}{2}\xi_x^2 - \frac{1}{2}\xi_y^2\right) H_n(\xi_x) H_n(\xi_y)
\end{aligned}$$

Mivel: $-iq_y(\xi_y + q_x) + iq_x(\xi_x - q_y) - i(\xi_x - q_y)(\xi_y + q_x) = -iq_x q_y - i\xi_x \xi_y$

$$c_{n,k_x,k_y} = N_n^2 L_H e^{-iq_x q_y} \int \int d\xi_x d\xi_y \exp(-i\xi_x \xi_y) \exp\left(-\frac{1}{2}\xi_x^2 - \frac{1}{2}\xi_y^2\right) H_n(\xi_x) H_n(\xi_y) \quad (8.150)$$

8.4. Állítás

$$\sqrt{2\pi} \exp\left(-\frac{1}{2}\xi_y^2\right) H_n(\xi_y) = \int d\xi_x \exp(i\xi_x \xi_y) \exp\left(-\frac{1}{2}\xi_x^2\right) H_n(\xi_x) \quad (8.151)$$

Bizonyítás. A harmonikus oszcillátor Schrödinger-egyenlete koordinátareprezentációban

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2\right) \psi(x) = E \psi(x) , \quad (8.152)$$

impulzusreprezentációban

$$\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2} \hbar^2 m \omega^2 \frac{d^2}{dp^2}\right) \tilde{\psi}(p) = E \tilde{\psi}(p) , \quad (8.153)$$

miközben

$$\tilde{\psi}(p) = \sqrt{\frac{1}{\hbar}} \int dx \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) \psi(x) . \quad (8.154)$$

A megoldások

$$\psi_n(x) = N_n \frac{1}{\sqrt{x_0}} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right) H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) , \quad (8.155)$$

ahol

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} , \quad (8.156)$$

valamint

$$\psi_n(p) = N_n \frac{1}{\sqrt{p_0}} \exp\left(-\frac{p^2}{2p_0^2}\right) H_n\left(\frac{p}{p_0}\right) , \quad (8.157)$$

ahol

$$p_0 = \sqrt{\hbar m \omega} . \quad (8.158)$$

Következésképpen

$$\frac{1}{\sqrt{p_0}} \exp\left(-\frac{p^2}{2p_0^2}\right) H_n\left(\frac{p}{p_0}\right) = \frac{1}{\sqrt{x_0}} \sqrt{\frac{1}{\hbar}} \int dx \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right) H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) , \quad (8.159)$$

amiből

$$\xi_x = \frac{x}{x_0} , \quad \xi_y = \frac{p}{p_0} \quad (8.160)$$

helyettesítéssel

$$\exp\left(-\frac{1}{2}\xi_y^2\right) H_n(\xi_y) = \underbrace{\sqrt{\frac{x_0 p_0}{\hbar}}}_{1/\sqrt{2\pi}} \int d\xi_x \exp(i\xi_x \xi_y) \exp\left(-\frac{1}{2}\xi_x^2\right) H_n(\xi_x) , \quad (8.161)$$

ami ekvivalens az állítással. □

Így tehát, a Hermite polinomok normaintegrálját felhasználva:

$$\begin{aligned} c_{n,k_x,k_y} &= \sqrt{2\pi} L_H \exp(-iq_x q_y) \underbrace{N_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp(-\xi^2) H_n(\xi)^2}_{=1} \\ &= \sqrt{2\pi} L_H \exp(-ik_x k_y / L_H^2) . \end{aligned} \quad (8.162)$$

8.9 Megoldás A klasszikus körmozgás

$$x = x_0 + r \cos \omega_c t , \quad y = y_0 + r \sin \omega_c t \quad (8.163)$$

$$v_x = -r\omega_c \sin \omega_c t , \quad v_y = r\omega_c \cos \omega_c t \quad (8.164)$$

alapján a pálya középpontjának helykoordinátái

$$x_0 = x - r \cos \omega_c t = x - \frac{v_y}{\omega_c} = x - \frac{K_y}{m\omega_c} \quad (8.165)$$

$$y_0 = y - r \sin \omega_c t = y + \frac{v_x}{\omega_c} = y + \frac{K_x}{m\omega_c} \quad (8.166)$$

melyekhez a megfelelő operátorokat rendelhetjük. Fennállnak a következő csererelációk

$$[x_0, y_0] = iL_H^2 \quad (8.167)$$

$$[x_0, H] = [y_0, H] = 0 \quad (8.168)$$

ahol $L_H = \sqrt{\hbar/m\omega_c}$, illetve $\omega_c = qB/m$. Ugyanis

$$[K_x, K_y] = -q([p_x, A_y] + [A_x, p_y]) = -q\frac{\hbar}{i}(\partial_x A_y - \partial_y A_x) = i\hbar qB = i\hbar m\omega_c \quad (8.169)$$

miatt

$$[x_0, y_0] = \frac{1}{m\omega_c} \underbrace{[x, K_x]}_{i\hbar} - \frac{1}{m\omega_c} \underbrace{[y, K_y]}_{i\hbar} - \frac{1}{m^2\omega_c^2} \underbrace{[K_y, K_x]}_{-i\hbar m\omega_c} = \frac{i\hbar}{m\omega_c} = iL_H^2 , \quad (8.170)$$

valamint

$$[K_y, K_x^2] = [K_y, K_x] K_x + K_x [K_y, K_x] = \frac{\hbar}{i} 2m\omega_c K_x \quad (8.171)$$

$$[x, K_x^2] = [x, K_x] K_x + K_x [x, K_x] = -\frac{\hbar}{i} 2K_x \quad (8.172)$$

és innen

$$[x_0, H] = \left[x + \frac{K_y}{m\omega_c}, \frac{1}{2m} (K_x^2 + K_y^2) \right] = -\frac{\hbar}{im} K_x + \frac{\hbar}{im} K_x = 0 \quad . \quad (8.173)$$

Ezért x_0 és y_0 megmaradó mennyiségek. Ugyanakkor definiálhatók a

$$b = \frac{1}{L_H\sqrt{2}} (x_0 + iy_0) \quad , \quad b^\dagger = \frac{1}{L_H\sqrt{2}} (x_0 - iy_0) \quad (8.174)$$

léptetőoperátorok, melyekre

$$[b, b^\dagger] = \frac{-i}{L_H^2} [x_0, y_0] = 1 \quad , \quad (8.175)$$

és

$$[b, H] = [b^\dagger, H] = 0 \quad . \quad (8.176)$$

Ezért a b és b^\dagger operátorok H sajátalterén belül léptetnek. Mivel

$$[K_x, x_0] = \left[K_x, x - \frac{K_y}{m\omega_c} \right] = \frac{2\hbar}{i} \quad (8.177)$$

$$[K_x, y_0] = \left[K_x, y + \frac{K_x}{m\omega_c} \right] = 0 \quad (8.178)$$

$$[K_y, y_0] = \left[K_y, y - \frac{K_x}{m\omega_c} \right] = \frac{2\hbar}{i} \quad (8.179)$$

$$[K_y, x_0] = \left[K_y, x + \frac{K_y}{m\omega_c} \right] = 0 \quad , \quad (8.180)$$

következik, hogy

$$\begin{aligned} [a, b] &= \frac{1}{2L_H^2} \frac{1}{m\omega_c} [K_x + iK_y, x_0 + iy_0] \\ &= \frac{1}{2L_H^2} \frac{1}{m\omega_c} \left(2\frac{\hbar}{i} - 2\frac{\hbar}{i} \right) = 0 \end{aligned} \quad (8.181)$$

és hasonlóan

$$[a^\dagger, b^\dagger] = 0 \quad , \quad (8.182)$$

viszont

$$[a, b^\dagger] = [a^\dagger, b] = \frac{1}{L_H^2} \frac{2\hbar}{im\omega_c} = -2i \quad . \quad (8.183)$$

Egy általános Landau-állapot tehát

$$H |n, m\rangle = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) |n, m\rangle \quad (8.184)$$

$$|n, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{m!}} (a^\dagger)^n (b^\dagger)^m |0, 0\rangle \quad . \quad (8.185)$$

8.10 Megoldás *Először oldjuk meg a harmonikus oszcillátor problémát homogén elektromos tér jelenlétében!*

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2 + \mathcal{E}qx \quad (8.186)$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 \left(x + \frac{\mathcal{E}q}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{\mathcal{E}^2 q^2}{2m\omega^2} \quad (8.187)$$

Vezessük be a következő mennyiségeket:

$$d = \frac{\mathcal{E}q}{m\omega^2}, \quad E_0 = \frac{\mathcal{E}^2 q^2}{2m\omega^2}.$$

A bevezetett mennyiségekkel a (8.187) számú egyenletet a következő formába írhatjuk:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 (x + d)^2 - E_0.$$

A fenti Hamilton operátor spektruma a külső tér nélküli operátor spektrumától csak egy E_0 eltolásban különbözik, a sajátállapotaik pedig d -vel tolódnak el. A külső tér nélküli harmonikus oszcillátor léptető operátorai segítségével felírhatjuk a homogén külső tér jelenlétében is a léptető operátorokat: $a' = a + \frac{d}{\sqrt{2x_0}}$, $a'^{\dagger} = a^{\dagger} + \frac{d}{\sqrt{2x_0}}$. Az alapállapot hullámfüggvény d -vel eltolódik:

$$|n\rangle' = \frac{1}{\sqrt{n!}} a'^{\dagger n} |0\rangle' = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^{\dagger} + d) e^{\frac{i}{\hbar} dp} |0\rangle. \quad (8.188)$$

Kezdetben a rendszer tér nélküli harmonikus oszcillátor alapállapotában van. Ezt skálárisan szorozva a tér jelenlétében lévő Hamilton operátor sajátállapotaival megkaphatjuk a szuperponált állapot együtthatóit:

$$\langle 0|n\rangle' = \langle 0| \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^{\dagger} + \frac{d}{\sqrt{2x_0}})^n e^{\frac{i}{\hbar} dp} |0\rangle.$$

Fejezzük ki az impuzus operátort az eltolás operátorban a léptető operátorok segítségével:

$$e^{\frac{i}{\hbar} dp} = e^{\frac{d}{x_0}(a-a^{\dagger})} \quad (8.189)$$

Használjuk a 1.3. feladatban szereplő Baker-Campbell-Hausdorff formulát: $e^{A+B} = e^A e^B e^{\frac{[A,B]}{2}}$, amely csak akkor érvényes ha a $[A, [A, B] = [B, [A, B] = 0$ feltétel teljesül. A mi esetünkben $[a, a^{\dagger}] = 1$, így az eltolás operátorát a következőképpen írhatjuk fel:

$$e^{\frac{d}{x_0}(a-a^{\dagger})} = e^{-\frac{d^2}{4x_0^2}} e^{-\frac{d}{x_0} a^{\dagger}} e^{\frac{d}{x_0} a}. \quad (8.190)$$

Tehát

$$\begin{aligned} \langle 0|n\rangle' &= \langle 0| \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^{\dagger} + \frac{d}{\sqrt{2x_0}})^n e^{\frac{i}{\hbar} dp} |0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{d^2}{4x_0^2}} \langle 0| \sum_{j=0}^n \binom{n}{j} \left(\frac{d}{\sqrt{2x_0}}\right)^{n-j} (-a^{\dagger})^j e^{-\frac{d}{x_0} a^{\dagger}} e^{\frac{d}{x_0} a} |0\rangle. \end{aligned}$$

A jobboldali első exponenciális tag sorfejtésében csak a nulladrendű tag marad meg, hiszen az az alapállapotra hat, a második exponenciálisban és az összegzésben is csak a nulladrendű tagok számítanak az ortogonalitás miatt:

$$\langle 0|n\rangle' = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{d}{\sqrt{2}x_0} \right)^n e^{-\frac{d^2}{4x_0^2}}.$$

A kifejtési együtthatók négyzetösszege egységnyi kell, hogy legyen!

$$e^{-\frac{d^2}{2x_0^2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{d^2}{2x_0^2} \right)^n = 1,$$

hiszen az összegzés éppen a $e^{\frac{d^2}{x_0^2}}$ függvény sora.

A hullámfüggvény a homogén elektromos tér bekapcsolásának a pillanatában a következő alakot ölti:

$$|\phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{d}{\sqrt{2}x_0} \right)^n e^{-\frac{d^2}{4x_0^2}} |n\rangle' \quad (8.191)$$

Az egyes sajátállapotok időfejlődését egyszerűen megadhatjuk a sajátenergiák ismeretében:

$$\varphi_n(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}, \quad (8.192)$$

ennek megfelelően a (8.191) hullámfüggvény időfejlődését a következőképpen adhatjuk meg:

$$\phi(t) = e^{-i\left(\frac{\omega}{2} - \frac{E_0}{\hbar}\right)t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{d}{\sqrt{2}x_0} \right)^n e^{-\frac{d^2}{4x_0^2}} |n\rangle' e^{-in\omega t}.$$

9. fejezet

Relativisztikus kvantummechanika

9.1. Elmélet

9.1.1. Lorentz-transzformáció

Az eddigiektől eltérően ebben a fejezetben a relativisztikus tárgyaláshoz jobban illeszkedő CGS egységrendszert használjuk. A négydimenziós téridő-vektorokra (Minkowski-tér) az egyszerűség kedvéért az $(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x, y, z, ict) = (\mathbf{x}, ict)$ jelölést alkalmazzuk. Az

$$x_\mu x_\mu = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 = \mathbf{x}^2 - c^2 t^2, \quad (9.1)$$

normát megtartó $\mathbf{a} = \{a_{\mu\nu}\}$ homogén Lorentz-transzformációra ($x'_\mu = a_{\mu\nu} x_\nu$) fennáll, hogy

$$\mathbf{a}^T \mathbf{a} = \mathbf{1} \iff a_{\mu\nu} a_{\mu\rho} = \delta_{\nu\rho}. \quad (9.2)$$

Ebből következik, hogy $\det(\mathbf{a}) = \pm 1$. Valódi ill. nem valódi Lorentz transzformációról beszélünk, ha $\det(\mathbf{a}) = 1$ ill. -1 . Az ε infinitezimális Lorentz transzformációra, amit az $\mathbf{a} = e^\varepsilon$ összefüggéssel definiálunk, az

$$\varepsilon^T = -\varepsilon \iff \varepsilon_{\mu\nu} = -\varepsilon_{\nu\mu}, \quad (9.3)$$

$$(\varepsilon_{ij} \in \mathbb{R}, \text{ ha } i, j = 1, 2, 3, \quad \varepsilon_{j4} \in \mathfrak{S}, \text{ ha } j = 1, 2, 3) \quad (9.4)$$

reláció teljesül. A homogén Lorentz-transzformációkat hat szabad paraméterrel írhatjuk le (három paraméter a koordinátatengelyek relatív orientációját, három paraméter pedig a két inerciarendszer relatív sebességét határozza meg.)

A Hamilton-függvény,

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2} + q\phi(\mathbf{r}, t), \quad (9.5)$$

ahol m a részecske nyugalmi tömege, $\phi(\mathbf{r}, t)$ a skalárpotenciál és $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ a vektorpotenciál. A fenti összefüggést átírhatjuk a

$$K_\mu K_\mu = -m^2 c^2, \quad (9.6)$$

Lorentz-invariáns alakba, ahol $K_\mu = p_\mu - \frac{q}{c} A_\mu$ a négyes kinetikus impulzus, $p_\mu = \left(\mathbf{p}, i \frac{H}{c} \right)$ a négyes kanonikus impulzus és $A_\mu = (\mathbf{A}, i\phi)$ a négyespotenciál.

9.1.2. A Klein-Gordon-egyenlet

A kanonikus kvantálás szellemében megőrizzzük a koordináta és a kanonikus impulzus operátorok felcserélési relációját,

$$[p_\mu, x_\nu] = \frac{\hbar}{i} \delta_{\mu\nu} , \quad (9.7)$$

ezért koordináta reprezentációban a négyesimpulzus operátort a következőképpen definiáljuk,

$$p_\mu = \frac{\hbar}{i} \partial_\mu = \left(\frac{\hbar}{i} \nabla, -\frac{\hbar}{c} \partial_t \right) . \quad (9.8)$$

Innen a kinetikus impulzus operátora

$$K_\mu = \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A}, \frac{i}{c} (i\hbar \partial_t - q\phi) \right) , \quad (9.9)$$

amit formálisan behelyettesítve a Lorentz-invariáns (9.6) egyenletbe a *Klein-Gordon egyenletet* nyerjük:

$$\left[\left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{1}{c^2} (i\hbar \partial_t - q\phi)^2 \right] \psi(\mathbf{r}, t) = -m^2 c^2 \psi(\mathbf{r}, t) . \quad (9.10)$$

Szabad részecskére a fenti egyenlet a

$$\left[\Delta - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 \right] \psi(\mathbf{r}, t) = \kappa^2 \psi(\mathbf{r}, t) \quad (9.11)$$

alakra redukálódik, ahol $\kappa = mc/\hbar$ a Compton hullámszám. Az egyenlet megoldása a

$$\psi(\mathbf{r}, t) = N \exp \left(\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}\mathbf{r} - Et) \right) \quad (9.12)$$

síkhullám, ahol a (9.5) egyenletnek megfelelően teljesül az $E^2 = c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4$ reláció.

A Klein-Gordon-egyenlet a hidrogénatom energiaspektrumának finomszerkezetére a kísérleteknek ellentmondó predikciót ad. Az egyenletből levezethető kontinuitási egyenletben a megtalálási valószínűsége sűrűsége a

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{mc^2} \text{Im} (\psi(\mathbf{r}, t) \partial_t \psi^*(\mathbf{r}, t)) \quad (9.13)$$

kifejezés adódik, mely negatív értéket is felvehet. A hullámfüggvény skalár volta miatt nincsen lehetőség spin értelmezésére sem, így a Klein-Gordon-egyenlet a nulla spinű részecskék (pl. π -mezonok) téregyenlete.

9.1.3. A Dirac egyenlet

Paul Dirac nyomán (1928) a hullámfüggvény mozgásegyenletében p_μ lineáris funkcionálját engedjük meg,

$$(\varpi + \gamma_\mu p_\mu) \psi = 0 , \quad (9.14)$$

ahol az ϖ és γ_μ operátorok felcserélhetők a p_μ operátorokkal. Ezt úgy interpretálhatjuk, hogy a $|\psi\rangle$ hullámfüggvény a négyzetesen integrálható függvények Hilbert-terének (ahol a p_μ operátorok hatnak) és egy új szabadsági fokokat reprezentáló Hilbert-tér (ahol az ϖ és γ_μ operátorok hatnak) direktszorzatának eleme. Szeretnénk ugyanakkor, ha érvényben maradna a relativisztikus energia-impulzus összefüggés, amit a következő kvantummechanikai várható érték fejez ki,

$$\langle\psi| (p_\mu p_\mu + m^2 c^2) I |\psi\rangle = 0 , \quad (9.15)$$

ahol I az előbb említett új Hilbert tér egységoperátora. Feltételezve, hogy a γ_μ operátorok hermitikusak, némi algebrai átalakítás után az $\varpi = -i mc I$ egyenlőség és a

$$\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu} , \quad (9.16)$$

antikommutátor relációk következnek (Clifford-algebra).

9.1. Tétel *A γ_μ operátorok véges, n dimenziós ábrázolásaira fennáll, hogy n páros.*

Bizonyítás. (i) Belátható, hogy bármely γ_μ operátor nyoma zérus. Ugyanis $\mu \neq \nu$ esetén,

$$\text{Tr}\gamma_\mu = \text{Tr}\gamma_\mu \gamma_\nu^2 = \text{Tr}\gamma_\nu \gamma_\mu \gamma_\nu = -\text{Tr}\gamma_\nu^2 \gamma_\mu = -\text{Tr}\gamma_\mu , \quad (9.17)$$

ahol felhasználtuk a nyomképzés ciklikus tulajdonságát.

(ii) Mivel $\gamma_\mu^2 = I$, γ_μ lehetséges sajátértékei 1 vagy -1 .

Tételezzük fel, hogy m sajátérték 1 és $n - m$ sajátérték -1 . Ekkor,

$$\text{Tr}\gamma_\mu = m - (n - m) = 2m - n = 0 , \quad (9.18)$$

tehát n páros. □

Csoportelméleti módszerekkel is belátható, hogy n minimális értéke négy. A γ_μ operátorok egy lehetséges 4×4 -es mátrixreprezentációja (*standard ábrázolás*):

$$\gamma_j = i \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix} \quad (j = 1, 2, 3) \quad \text{és} \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} , \quad (9.19)$$

ahol σ_j a szokásos Pauli mátrixok és I_2 a 2×2 -es egységmátrix. A Dirac egyenletben szereplő hullámfüggvények következésképpen négykomponensűek:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \psi_2(\mathbf{r}, t) \\ \psi_3(\mathbf{r}, t) \\ \psi_4(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} . \quad (9.20)$$

9.1.4. A Dirac-féle Hamilton-operátor

Dirac egyenlete tehát szabad részecskére,

$$(\gamma_\mu p_\mu - imc) \psi = 0 \quad (9.21)$$

vagy

$$(\gamma_\mu \partial_\mu + \varkappa) \psi = 0 \quad (9.22)$$

alakú. Posztuláljuk, hogy elektromágneses tér jelenléte esetén a Dirac-egyenletbe a p_μ kanonikus impulzusok helyett a K_μ kinetikus impulzusok írhatók:

$$(\gamma_\mu K_\mu - imc) \psi = 0 . \quad (9.23)$$

Könnyen belátható, hogy a hullámfüggvény

$$\psi' = \psi \exp\left(\frac{iq}{\hbar c} \Lambda\right) \quad (9.24)$$

transzformációjával a Dirac egyenlet invariáns a

$$A' = A + \nabla \Lambda, \quad \phi' = \phi - \frac{1}{c} \partial_t \Lambda \quad \longrightarrow \quad A'_\mu = A_\mu + \partial_\mu \Lambda \quad (9.25)$$

mértéktranszformációval szemben!

A K_μ operátorok ismert alakját behelyettesítve a (9.23) egyenletbe kapjuk, hogy

$$\left[\gamma \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) + \gamma_4 \left(-\frac{\hbar}{c} \partial_t - \frac{iq}{c} \phi \right) - imc \right] \psi = 0 \quad , \quad (9.26)$$

melyet $ci\gamma_4$ -gyel balról szorozva,

$$\left[ci\gamma_4 \gamma \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) + (-i\hbar \partial_t + q\phi) + \gamma_4 mc^2 \right] \psi = 0 \quad , \quad (9.27)$$

majd az idő szerinti deriváltat külön kezelve nyerjük a következő egyenletet,

$$i\hbar \partial_t \psi = \left[ci\gamma_4 \gamma \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) + q\phi + \gamma_4 mc^2 \right] \psi \quad . \quad (9.28)$$

Vezessük be az $\alpha \equiv i\gamma_4 \gamma$ és $\beta \equiv \gamma_4$ mátrixokat. Az α_k mátrixok alakja,

$$\alpha_k = i^2 \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} , \quad (9.29)$$

míg nyilvánvalóan

$$\beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} . \quad (9.30)$$

Az új mátrixokkal a Dirac egyenlet az

$$i\hbar \partial_t \psi = H \psi \quad (9.31)$$

alakot ölti, ahol a *relativisztikus Hamilton-operátor*,

$$H = c \alpha \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) + q\phi + \beta mc^2 , \quad (9.32)$$

mely az α és β mátrixok ismeretében nyilvánvalóan hermitikus. Időfüggetlen potenciálok esetében, a stacionárius hullámfüggvényt $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right)$ alakban keresve a Hamilton-operátor sajátérték problémájához, azaz az *időtől független Dirac-egyenlethez* jutunk

$$H \psi(\mathbf{r}) = \left[c \alpha \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) + q\phi + \beta mc^2 \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) . \quad (9.33)$$

A kontinuitási egyenlet

Induljunk ki a Dirac-egyenlet

$$i\hbar\partial_t\psi = c\alpha\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)\psi + q\phi\psi + \beta mc^2\psi \quad (9.34)$$

alakjából. Az adjungált egyenlet:

$$-i\hbar\partial_t\psi^\dagger = -c\alpha\left(\mathbf{p} + \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)\psi^\dagger + q\phi\psi^\dagger + mc^2\psi^\dagger\beta, \quad (9.35)$$

ahol

$$\psi^\dagger = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*) , \quad (9.36)$$

és felhasználtuk, hogy $(\mathbf{p}\psi)^\dagger = [(\frac{\hbar}{i}\nabla\psi_1)^*, \dots] = -[(\frac{\hbar}{i}\nabla\psi_1^*), \dots] = -\mathbf{p}\psi^\dagger$. Az első egyenletet ψ^\dagger -szal balról, a másodikat ψ -vel jobbról beszorozva, majd az így nyert két egyenletet egymásból kivonva kapjuk, hogy

$$i\hbar[\psi^\dagger\partial_t\psi + (\partial_t\psi^\dagger)\psi] = c[\psi^\dagger\alpha\mathbf{p}\psi + (\mathbf{p}\psi^\dagger)\alpha\psi] \quad (9.37)$$

↓

$$\partial_t(\psi^\dagger\psi) + \nabla(c\psi^\dagger\alpha\psi) = 0, \quad (9.38)$$

amiből a megtalálási valószínűség és áramsűrűség megfelelő definíciójával,

$$\rho = \psi^\dagger\psi \quad \text{és} \quad \mathbf{j} = c\psi^\dagger\alpha\psi, \quad (9.39)$$

a

$$\partial_t\rho + \text{div}\mathbf{j} = 0 \quad (9.40)$$

kontinuitási egyenlet kapható. Nyilvánvaló, hogy ρ pozitív definit, tehát a Dirac-egyenlet által leírt részecskére alkalmazható a kvantummechanika valószínűségi értelmezése. A

$$j_\mu = (\mathbf{j}, ic\rho) = ic\psi^\dagger\gamma_4\gamma_\mu\psi \quad (9.41)$$

négyes áramsűrűségvektorral a kontinuitási egyenlet a kovariáns

$$\partial_\mu j_\mu = 0 \quad (9.42)$$

alakban írható, azaz tetszőleges inerciarendszerben érvényes.

9.1.5. A Dirac-egyenlet Lorentz-invarianciája

Homogén Lorentz-transzformáció,

$$x'_\mu = a_{\mu\nu}x_\nu, \quad \partial'_\mu = a_{\mu\nu}\partial_\nu, \quad A'_\mu(x') = a_{\mu\nu}A_\nu(x), \quad (9.43)$$

hatására a

$$\left[\gamma_\mu\left(\frac{\hbar}{i}\partial_\mu - \frac{q}{c}A_\mu(x)\right) - imc\right]\psi(x) = 0. \quad (9.44)$$

Dirac-egyenlet a következőképpen transzformálódik:

$$\left[\gamma_\mu \left(\partial'_\mu - \frac{iq}{\hbar c} A'_\mu(x') \right) - imc \right] \psi'(x') = \quad (9.45)$$

$$\left[\gamma_\mu a_{\mu\nu} \left(\partial_\mu - \frac{iq}{\hbar c} A_\mu(x) \right) - imc \right] \psi'(x') = 0, \quad (9.46)$$

ahol $\psi'(x')$ a transzformált hullámfüggvény. Jelöljük \mathcal{T} -vel a transzformáció ábrázolását a négydimenziós Hilbert téren, mely értelemszerűen a γ_μ -hez hasonlóan 4×4 -es mátrix. A hullámfüggvény transzformációját,

$$\psi'(x') = \mathcal{T} \psi(x), \quad (9.47)$$

beírva a (9.46) egyenletbe,

$$\left[\gamma_\mu a_{\mu\nu} \left(\partial_\mu - \frac{iq}{\hbar c} A_\mu(x) \right) \mathcal{T} - imc \mathcal{T} \right] \psi(x) = 0, \quad (9.48)$$

majd a (9.44) egyenlet segítségével eliminálva az $imc \mathcal{T} \psi(x)$ tagot, a

$$(\mathcal{T} \gamma_\mu - \gamma_\nu a_{\nu\mu} \mathcal{T}) \left(\partial_\mu - \frac{iq}{\hbar c} A_\mu(x) \right) \psi(x) = 0 \quad (9.49)$$

egyenletet kapjuk. Tetszőleges hullámfüggvény és négyespotenciál esetén ez csak úgy teljesülhet, ha megköveteljük a

$$\mathcal{T} \gamma_\mu - \gamma_\nu a_{\nu\mu} \mathcal{T} = 0 \quad (9.50)$$

egyenlőséget, azaz

$$\mathcal{T} \gamma_\mu \mathcal{T}^{-1} = \gamma_\nu a_{\nu\mu}. \quad (9.51)$$

Kihasználva, hogy $\mathbf{a}^T = \mathbf{a}^{-1}$, a fenti összefüggés átírható a

$$\mathcal{T}^{-1} \gamma_\mu \mathcal{T} = a_{\mu\nu} \gamma_\nu \quad (9.52)$$

alakra. Ez a γ_ν mátrixok (operátor értékű vektorok) transzformációs szabálya. Belátható, hogy a (9.51) egyenlet megoldása:

$$\mathcal{T} = e^{\frac{1}{4} \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_\mu \gamma_\nu}. \quad (9.53)$$

Mivel

$$\frac{1}{4} \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_\mu \gamma_\nu = \frac{1}{8} \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_\mu \gamma_\nu + \frac{1}{8} \varepsilon_{\nu\mu} \gamma_\nu \gamma_\mu \quad (9.54)$$

$$= \frac{1}{8} \varepsilon_{\mu\nu} (\gamma_\mu \gamma_\nu - \gamma_\nu \gamma_\mu) = \frac{1}{8} \varepsilon_{\mu\nu} [\gamma_\mu, \gamma_\nu] \quad (9.55)$$

a \mathcal{T} transzformáció a

$$\mathcal{T} = e^{\frac{i}{\hbar} S_{\mu\nu} \varepsilon_{\mu\nu}} \quad (9.56)$$

formában is írható, ahol

$$S_{\mu\nu} = \frac{\hbar}{8i} [\gamma_\mu, \gamma_\nu], \quad (9.57)$$

a hullámfüggvény Lorentz-transzformációjának infinitezimális generátora.

9.1.6. Fizikai mennyiségek Lorentz-transzformációja

Az O hermitikus operátorral megadott fizikai mennyiségnek egy adott ψ állapotban a Minkowski-téren értelmezett sűrűsége,

$$O(x) = \psi(x)^\dagger O \psi(x) . \quad (9.58)$$

$O(x)$ Lorentz-transzformációval szembeni viselkedésének vizsgálatához célszerű bevezetni a hullámfüggvény *Dirac-adjungáltját*,

$$\bar{\psi}(x) = \psi(x)^\dagger \gamma_4 , \quad (9.59)$$

mellyel

$$O(x) = \bar{\psi}(x) \gamma_4 O \psi(x) . \quad (9.60)$$

Így pl. a valószínűségi sűrűség és az áramsűrűség ill. a négyes áramsűrűség rendre a

$$\varrho(x) = \bar{\psi}(x) \gamma_4 \psi(x) , \quad j_k(x) = ic\bar{\psi}(x) \gamma_k \psi(x) \quad (k = 1, 2, 3) , \quad (9.61)$$

$$j_\mu(x) = (\underline{j}(x), ic\varrho(x)) = ic\bar{\psi}(x) \gamma_\mu \psi(x) , \quad (9.62)$$

formában írhatók.

Belátható, hogy a Lorentz-transzformáció (9.53) ábrázolására fennáll a következő:

$$\mathcal{T}^\dagger \gamma_4 = \gamma_4 \mathcal{T}^{-1} . \quad (9.63)$$

Emiatt az $O(x)$ sűrűség transzformáltja:

$$\begin{aligned} O'(x') &= \psi'(x)^\dagger O \psi'(x') = [\mathcal{T} \psi(x)]^\dagger O \mathcal{T} \psi(x) \\ &= \psi(x)^\dagger \mathcal{T}^\dagger O \mathcal{T} \psi(x) = \psi(x)^\dagger \mathcal{T}^\dagger \gamma_4 \gamma_4 O \mathcal{T} \psi(x) \\ &= \psi(x)^\dagger \gamma_4 \mathcal{T}^{-1} \gamma_4 O \mathcal{T} \psi(x) \\ &= \bar{\psi}(x) (\mathcal{T}^{-1} \gamma_4 O \mathcal{T}) \psi(x) . \end{aligned} \quad (9.64)$$

A (9.51) és (9.64) egyenletek alapján,

$$\begin{aligned} j'_\mu(x') &= ic\bar{\psi}(x) (\mathcal{T}^{-1} \gamma_\mu \mathcal{T}) \psi(x) \\ &= ic\bar{\psi}(x) (a_{\mu\nu} \gamma_\nu) \psi(x) = a_{\mu\nu} [ic\bar{\psi}(x) \gamma_\nu \psi(x)] \\ &= a_{\mu\nu} j_\nu(x) , \end{aligned} \quad (9.65)$$

tehát a négyes áramsűrűség vektorként transzformálódik.

9.1.7. Térbeli forgatások és a spin

Az \mathbf{n} egységvektorral definiált tengely körüli φ szögű térbeli forgatás mátrixa,

$$R(\varphi, \mathbf{n}) = \exp(-in\mathbf{X}\varphi) , \quad (9.66)$$

ahol

$$(X_k)_{ij} = -i\varepsilon_{ijk} \quad (k = 1, 2, 3). \quad (9.67)$$

Az infinitezimális Lorentz-transzformáció mátrixa tehát,

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ijk}n_k\varphi \quad (i, j = 1, 2, 3), \quad \varepsilon_{\mu 4} = \varepsilon_{4\mu} = 0 \quad (\mu = 1, 2, 3, 4), \quad (9.68)$$

melynek ábrázolása a 4-dimenziós Hilbert-téren,

$$\tau = \frac{1}{4}\varepsilon_{\mu\nu}\gamma_\mu\gamma_\nu = -\frac{1}{4}\varepsilon_{ijk}\gamma_j\gamma_kn_k\varphi = -\frac{i}{\hbar}\mathbf{n}\mathbf{S}\varphi,$$

ahol

$$S_i = -\frac{i\hbar}{4}\varepsilon_{ijk}\gamma_j\gamma_k, \quad (9.69)$$

vagy

$$S_1 = -\frac{\hbar}{2}i\gamma_2\gamma_3, \quad S_2 = -\frac{\hbar}{2}i\gamma_3\gamma_1, \quad S_3 = -\frac{\hbar}{2}i\gamma_1\gamma_2, \quad (9.70)$$

Nézzük meg az S_i mátrixok felcserélési relációit:

$$[S_1, S_2] = \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^2 [\gamma_2\gamma_3, \gamma_3\gamma_1] = \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^2 (\gamma_2\gamma_3\gamma_3\gamma_1 - \gamma_3\gamma_1\gamma_2\gamma_3) \quad (9.71)$$

$$= -2\left(\frac{i\hbar}{2}\right)^2 \gamma_1\gamma_2 = i\hbar S_3, \quad (9.72)$$

és ugyanígy,

$$[S_2, S_3] = i\hbar S_1, \quad [S_3, S_1] = i\hbar S_2 \quad (9.73)$$

azaz

$$[S_i, S_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}S_k. \quad (9.74)$$

A térbeli forgatások \mathbf{S} infinitezimális generátora tehát egy impulzus momentum operátor, amit *spin*nek nevezünk. Mi ennek a spinnek az értéke?

$$S_1^2 = -\frac{\hbar^2}{4}\gamma_2\gamma_3\gamma_2\gamma_3 = \frac{\hbar^2}{4}I \quad (9.75)$$

és ugyanígy

$$S_2^2 = S_3^2 = \frac{\hbar^2}{4}I, \quad (9.76)$$

tehát

$$\mathbf{S}^2 = \frac{3\hbar^2}{4}I = \hbar^2s(s+1)I \implies s = \frac{1}{2}. \quad (9.77)$$

A Dirac-egyenlet által leírt hullámfüggvény komponenseit a térbeli forgatások hatására egy $\frac{1}{2}$ -es sajátértékű impulzusmomentum (spin) operátor transzformálja. Ezt úgy értelmezzük, hogy az elektron $s = \frac{1}{2}$ spinnel rendelkezik.

A γ_μ mátrixok standard ábrázolásait használva könnyen belátható, hogy

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}, \quad (9.78)$$

ahol

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}. \quad (9.79)$$

A hullámfüggvény transzformációja térbeli forgatásra tehát,

$$\psi'(R(\varphi, \mathbf{n}) \mathbf{r}, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{nS}\varphi\right) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (9.80)$$

illetve

$$\psi'(\mathbf{r}, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{nS}\varphi\right) \psi(R(-\varphi, \mathbf{n}) \mathbf{r}, t). \quad (9.81)$$

A 4.1.1 fejezetben bizonyítottuk, hogy

$$\psi(R(-\varphi, \mathbf{n}) \mathbf{r}, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{nL}\varphi\right) \psi(\mathbf{r}, t), \quad (9.82)$$

ahol $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ a (pálya)perdület operátora, ezért a négykomponensű hullámfüggvény (teljes) transzformációja a térbeli forgatásokkal szemben,

$$\psi'(\mathbf{r}, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{nJ}\varphi\right) \psi(\mathbf{r}, t), \quad (9.83)$$

azaz a relativisztikus kvantumelméletben a térbeli forgatások infinitezimális generátora a

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (9.84)$$

teljes impulzusmomentum operátor.

9.1.8. A szabad elektron

Zérus vektor- és skalárpotenciál esetén a (9.33) egyenlet,

$$\begin{pmatrix} mc^2 I_2 & c\sigma\hat{\mathbf{p}} \\ c\sigma\hat{\mathbf{p}} & -mc^2 I_2 \end{pmatrix} \psi(\mathbf{r}) = W\psi(\mathbf{r}), \quad (9.85)$$

megoldását kereshetjük a

$$\psi(\mathbf{r}) = U e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}\mathbf{r}} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}\mathbf{r}} \quad (9.86)$$

síkhullám alakban. Behelyettesítés után a

$$H(\mathbf{p}) U = W U \quad (9.87)$$

mátrix sajátértékegyenletet kapjuk, ahol

$$H(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} mc^2 I_2 & c\sigma\mathbf{p} \\ c\sigma\mathbf{p} & -mc^2 I_2 \end{pmatrix}. \quad (9.88)$$

Nemtriviális ($U \neq 0$) megoldás csak akkor létezik, ha a szekuláris mátrix determinánsa, $\det(W - H(\mathbf{p}))$, eltűnik. Kihasználva a $(\sigma\mathbf{p})(\sigma\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2 I_2$ azonosságot,

$$(W - mc^2)(W + mc^2) - c^2\mathbf{p}^2 = 0. \quad (9.89)$$

Innen a szabad részecske energiája a

$$W = \pm\sqrt{m^2c^4 + c^2\mathbf{p}^2} \quad (9.90)$$

értékeket veheti fel.

Röviden megjegyezzük, hogy $\mathbf{p} = 0$ esetén (álló részecske) mindkét pozitív és mindkét negatív energiás megoldásból a koordinátarendszer bármely tengelyére vonatkoztatva határozott, $\pm\hbar/2$ spinű állapotok keverhetők ki, hiszen

$$[H(\mathbf{0}), \Sigma] = 0. \quad (9.91)$$

Így a hullámfüggvény négy komponensét interpretálhatjuk úgy is, mint elektron fel spin, elektron le spin, pozitron fel spin és pozitron le spin komponens. Mozgó részecske esetén ($\mathbf{p} \neq 0$),

$$\left[\begin{pmatrix} mc^2 I_2 & \hbar c \sigma\mathbf{p} \\ \hbar c \sigma\mathbf{p} & -mc^2 I_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sigma\mathbf{p} & 0 \\ 0 & \sigma\mathbf{p} \end{pmatrix} \right] = 0, \quad (9.92)$$

ezért a megoldások a

$$h = \frac{\Sigma\mathbf{p}}{p} \quad (9.93)$$

ún. *helicitásoperátor* sajátértékeivel (± 1) indexelhetők. Úgy is megfogalmazhatjuk, hogy ekkor a spinnek a haladás irányára eső vetülete vesz fel $\pm\hbar/2$ értéket.

9.1.9. A nem-relativisztikus közelítés

Időfüggetlen potenciálok esetében a

$$[c\alpha\mathbf{K} + q\phi + \beta mc^2] \psi = W\psi \quad (9.94)$$

stacionárius Dirac egyenlet megoldását bontsuk fel két (egyenként két-komponensű) részre,

$$\psi = \begin{pmatrix} \chi \\ \varphi \end{pmatrix}, \quad (9.95)$$

ahol χ és φ az ún. nagy- és kiskomponens. A (9.94) egyenletet komponensenként felírva,

$$(W - mc^2 - q\phi) \chi - c\sigma\mathbf{K}\varphi = 0, \quad (9.96)$$

$$(W + mc^2 - q\phi) \varphi - c\sigma\mathbf{K}\chi = 0, \quad (9.97)$$

a második egyenletből a φ kiskomponens kifejezhető,

$$\varphi = (W + mc^2 - q\phi)^{-1} c\sigma\mathbf{K}\chi. \quad (9.98)$$

A szabad részecske megoldások mintájára, a pozitív energiás megoldást vizsgálva alkalmazhatjuk a $W + mc^2 - q\phi \simeq 2mc^2$ közelítést:

$$\varphi = \frac{1}{2mc} \sigma \mathbf{K} \chi . \quad (9.99)$$

Ezt visszahelyettesítve a (9.96) egyenletbe és használva a $E = W - mc^2$ jelölést, valamint alkalmazva a $\sigma_l \sigma_k = \delta_{lk} + i\varepsilon_{lkj} \sigma_j$ és $\mathbf{K} \times \mathbf{K} = -\frac{\hbar q}{ic} \mathbf{B}$ összefüggéseket, a χ nagykomponensre a szokásos Pauli-Schrödinger-egyenletet kapjuk a spin-paramágneses járulékot is beleértve,

$$E \chi = H_P \chi , \quad (9.100)$$

ahol a Pauli-Schrödinger Hamilton-operátor,

$$H_P = \frac{1}{2m} \mathbf{K}^2 + q\phi + \frac{\hbar q}{2mc} \sigma \mathbf{B} . \quad (9.101)$$

A spin-mágneszettségi áramsűrűség

Ebben a közelítésben a relativisztikus valószínűségi áramsűrűség a

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= c\psi^\dagger \alpha \psi = c (\chi^\dagger \sigma \varphi + \varphi^\dagger \sigma \chi) \\ &= \frac{1}{2m} \left(\chi^\dagger \sigma (\sigma \mathbf{K}) \chi + [(\mathbf{K}\chi)^\dagger \sigma] \sigma \chi \right) , \end{aligned} \quad (9.102)$$

alakban írható, mely a Pauli mátrixok algebráját használva két részre bontható:

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_{nr} + \mathbf{j}_m , \quad (9.103)$$

ahol

$$\mathbf{j}_{nr} = \frac{1}{2m} \left(\chi^\dagger \mathbf{K} \chi + (\mathbf{K}\chi)^\dagger \chi \right) \quad (9.104)$$

és

$$\mathbf{j}_m = \frac{i}{2m} \left(\chi^\dagger (\mathbf{K} \times \sigma) \chi - (\mathbf{K}\chi)^\dagger \times \sigma \chi \right) . \quad (9.105)$$

$\mathbf{K} = \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A}$ behelyettesítéssel a

$$\mathbf{j}_{nr} \equiv \frac{\hbar}{2im} \left(\chi^\dagger \nabla \chi - (\nabla \chi^\dagger) \chi \right) - \frac{q}{mc} \chi^\dagger \mathbf{A} \chi , \quad (9.106)$$

kifejezést nyerjük, ami valóban megegyezik a nemrelativisztikus eredménnyel (l. 8 Fejezet).

Az áramsűrűség második tagjából a valós vektorpotenciál eltűnik és

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_m &= \frac{\hbar}{i} \left(\chi^\dagger (\nabla \times \sigma) \chi + \nabla \chi^\dagger \times \sigma \chi \right) \\ &= \frac{\hbar}{2m} \nabla \times \chi^\dagger \sigma \chi = -\frac{c}{e} \text{rot} \left(\chi^\dagger \mathbf{M}_{sp} \chi \right) , \end{aligned} \quad (9.107)$$

ahol $\mathbf{M}_{sp} = -\frac{\hbar e}{2mc} \sigma$ a spin-mágneszettség operátora. A valószínűségi áramsűrűség ezen része tehát a spin-mágneszettség sűrűség rotációjával arányos, ezért divargenciamentes és nem jelenik meg a kontinuitási egyenletben.

A Hamilton-operátor relativisztikus korrekciói

A hullámfüggvény kiskomponensének (9.98) kifejezésében alkalmazott sorfejtésben továbblépve,

$$\varphi \simeq \frac{1}{2mc^2} \left(1 - \frac{E - q\phi}{2mc^2} \right) c\sigma\mathbf{K}\chi, \quad (9.108)$$

majd imételten visszahelyettesítve a (9.96) egyenletbe, némi átrendezés után a nagykomponensre az

$$E\chi = H_P\chi - \frac{1}{4m^2c^2}\sigma\mathbf{K}(E - q\phi)\sigma\mathbf{K}\chi \quad (9.109)$$

$$\simeq H_P\chi - \frac{1}{4m^2c^2}\sigma\mathbf{K}(H_P - q\phi)\sigma\mathbf{K}\chi, \quad (9.110)$$

egyenletet nyerjük, melyben a Pauli-Schrödinger Hamilton-operátor mellett megjelenik egy $1/c^2$ -tel arányos korrekció. A részletes levezetést mellőzve, melyben a kiskomponens normáját is $1/c^2$ rendben figyelembe vesszük, a következő sajátértékegyenlethez jutunk:

$$(H_P + H_M + H_D + H_{sp})\chi = E\chi, \quad (9.111)$$

ahol

$$H_M = -\frac{1}{8m^3c^2}K^4, \quad (9.112)$$

a kinetikus energia *relativisztikus tömegnövekedés* következtében fellépő korrekciója,

$$H_D = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\Delta(q\phi), \quad (9.113)$$

a *Darwin-tag*, mely a potenciális energia klasszikus analógiával nem rendelkező korrekciója és

$$H_{sp} = -\frac{\hbar q}{4m^2c^2}\sigma(\mathbf{E} \times \mathbf{K}) \quad (9.114)$$

a *spin-pálya kölcsönhatás*. Ez utóbbi elnevezést leginkább úgy érthetjük meg, hogy centrális potenciálra az elektromos térerősség,

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi(r) = -\frac{d\phi(r)}{dr}\frac{\mathbf{r}}{r}, \quad (9.115)$$

és a kinetikus impulzus kifejezésében a $-\frac{q}{c}\mathbf{A}$ tagot elhanyagolva a

$$H_{sp} = \frac{\hbar q}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{d\phi(r)}{dr}\sigma(\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = \frac{q}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{d\phi(r)}{dr}\mathbf{L}\mathbf{S}, \quad (9.116)$$

kifejezés adódik. A spin-pálya kölcsönhatásnak elsősorban nagyobb rendszámú elemek esetén ill. szilárdtestekben a kötött (atommaghoz közeli) pályák spin-pálya ($j = \ell \pm \frac{1}{2}$) felhasadásában van szerepe. Mágneses anyagokban ugyancsak elsősorban a spin-pálya kölcsönhatás felelős az ún. mágneses anizotrópia jelenségéért.

9.2. Feladatok

9.2.1. Példák

9.1. Feladat Bizonyítsa be, hogy $(\gamma_\mu \gamma_\nu)^2 = -I$ ($\mu \neq \nu$), ahol γ_μ a Dirac mátrixokat jelöli!

9.2. Feladat Bizonyítsuk be, hogy

$$\frac{d\mathbf{J}}{dt} = \frac{\hbar}{i} (\mathbf{r} \times \nabla(q\phi)) , \quad (9.117)$$

ahol $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ és $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}$. Használjuk a relativisztikus Hamilton operátor

$$H = c\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} + \beta mc^2 + q\phi \quad (9.118)$$

alakját!

9.3. Feladat Tekintsünk egy elektromágneses térben mozgó m tömegű, q töltésű relativisztikus részecskét. A kvantummechanikai időderivált segítségével mutassa meg, hogy a sebesség operátor

$$\mathbf{v} \equiv \frac{d\mathbf{r}}{dt} = c\boldsymbol{\alpha}$$

valamint

$$\mathbf{F} \equiv \frac{d\mathbf{K}}{dt} = \frac{q}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B} + q\mathbf{E} .$$

Segítség: $\frac{dO}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, O] + \frac{\partial O}{\partial t}$, $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$, $\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$

9.4. Feladat Vezessük le a „Zitterbewegung” jelenségét! Vizsgáljunk egy szabadon mozgó relativisztikus részecskét, és számítsuk ki a sebesség operátor időderiváltját! Oldjuk meg a kapott elsőrendű közönséges (operátor értékű) differenciálegyenletet, majd a hely operátort határozzuk meg ennek időintegráljaként! Milyen új tag jelenik meg az egyens vonalú egyenletes mozgást leíró rész mellett? Adjunk nagyságrendi becslést megjelenő új idő-és hosszskálákra!

Segítség: A levezetéskor használjuk fel az α és β mátrixok anitkommutátorait: $\{\alpha_k, \alpha_\ell\} = 2\delta_{k,\ell}$, $\{\alpha_k, \beta\} = 0$. Vezessük be a $V_k = c^2 p_k H^{-1}$ (szabad részecskére) időfüggetlen operátort!

9.5. Feladat Klein paradoxon: Vizsgáljuk meg, hogy hogyan szóródik egy relativisztikus kvantuumechanika szerint mozgó részecske egy végtelen széles V_0 magas potenciállépcsőn:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha } x < 0 \\ V_0, & \text{ha } x > 0 \end{cases} \quad \Psi_i = A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{pc}{E+mc^2} \\ 0 \end{pmatrix} e^{i\frac{pz}{\hbar}}, \quad (9.119)$$

ahol Ψ_i a bejövő részecske hullámfüggvénye. Számítsuk ki a reflexiós és transzmissziós együtthatókat. Mik ezek lehetséges értéke V_0 függvényében?

9.2.2. Megoldások

9.1 Megoldás Tekintsük először a $\mu \neq \nu = 1, 2, 3$ esetet:

$$\gamma_\mu \gamma_\nu = i \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_\mu \\ \sigma_\mu & 0 \end{pmatrix} i \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_\nu \\ \sigma_\nu & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_\mu \sigma_\nu & 0 \\ 0 & \sigma_\mu \sigma_\nu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\sigma_\lambda & 0 \\ 0 & i\sigma_\lambda \end{pmatrix} \quad (9.120)$$

Mivel $\sigma_\mu^2 = I_2$

$$(\gamma_\mu \gamma_\nu)^2 = \begin{pmatrix} i\sigma_\lambda & 0 \\ 0 & i\sigma_\lambda \end{pmatrix}^2 = - \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & I_2 \end{pmatrix} = -I_4 \quad (9.121)$$

Ha $\nu = 4$, akkor

$$(\gamma_\mu \gamma_4)^2 = \left[i \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_\mu \\ \sigma_\mu & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} \right]^2 = - \begin{pmatrix} 0 & \sigma_\mu \\ \sigma_\mu & 0 \end{pmatrix}^2 = - \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & I_2 \end{pmatrix} = -I_4 \quad (9.122)$$

9.2 Megoldás Zérus vektorpotenciált véve a Hamilton operátor

$$H = c\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} + \beta mc^2 + q\phi \quad (9.123)$$

alakú. Ekkor

$$[H, L_i] = [c\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} + q\phi, \varepsilon_{ijk}x_j p_k] \quad , \quad (9.124)$$

hiszen L_i kommutál βmc^2 -tel. (Az L_i operátor a négyesvektorok terén egységoperátorként hat, ezért valójában $L_i \otimes I$ -t kellene írunk.) A fenti kommutátort két részre bontva,

$$\begin{aligned} [c\alpha_l p_l, \varepsilon_{ijk}x_j p_k] &= c\varepsilon_{ijk}\alpha_l [p_l, x_j p_k] = c\varepsilon_{ijk}\alpha_l \left(\underbrace{[p_l, x_j] p_k}_{\frac{\hbar}{i}\delta_{lj}} - x_j \underbrace{[p_l, p_k]}_0 \right) \\ &= \frac{\hbar c}{i} (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p})_i \end{aligned} \quad (9.125)$$

$$\begin{aligned} [q\phi, \varepsilon_{ijk}x_j p_k] &= q\varepsilon_{ijk} [\phi, x_j p_k] = q\varepsilon_{ijk} \left(\underbrace{[\phi, x_j] p_k}_0 - x_j \underbrace{[\phi, p_k]}_{-\frac{\hbar}{i}\partial_k \phi} \right) \\ &= \frac{\hbar q}{i} (\mathbf{r} \times \nabla \phi)_i \quad , \end{aligned} \quad (9.126)$$

kapjuk, hogy

$$[H, \mathbf{L}] = \frac{\hbar}{i} [c(\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}) + q(\mathbf{r} \times \nabla \phi)] \quad , \quad (9.127)$$

melyből centrális potenciálra csak a második tag tűnik el. Relativisztikus esetben centrális potenciálra a pálya-impulzusmomentum nem mozgásállandó!

Bizonyítjuk, hogy centrális potenciál esetén a teljes impulzusmomentum

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (9.128)$$

mozgásállandó, ahol

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Sigma} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \quad (9.129)$$

a spin-operátor. Ugyanis

$$\begin{aligned}
[H, S_i] &= \frac{\hbar c}{2} [\alpha_l p_l, \Sigma_i] = \frac{\hbar c}{2} p_l [\alpha_l, \Sigma_i] = \\
&= \frac{\hbar c}{2} p_l \left[\begin{pmatrix} 0 & \sigma_l \\ \sigma_l & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_l \\ \sigma_l & 0 \end{pmatrix} \right] \\
&= \frac{\hbar c}{2} p_l \begin{pmatrix} 0 & [\sigma_l, \sigma_i] \\ [\sigma_l, \sigma_i] & 0 \end{pmatrix} = i\hbar c \varepsilon_{lik} p_l \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \\
&= -\frac{\hbar c}{i} (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p})_i \quad . \quad (9.130)
\end{aligned}$$

így tehát

$$\frac{d\mathbf{J}}{dt} = \frac{\hbar q}{i} (\mathbf{r} \times \nabla \phi) \quad , \quad (9.131)$$

ami centrális potenciálra valóban zérus.

9.3 Megoldás A sebesség operátor kifejezése:

$$\begin{aligned}
v_k &= \frac{d}{dt} x_k = \frac{i}{\hbar} [H, x_k] = \frac{i}{\hbar} [c\boldsymbol{\alpha}\mathbf{K} + \beta mc^2 + q\phi, x_k] = \\
&= \frac{i}{\hbar} c [\boldsymbol{\alpha}\mathbf{K}, x_k] = \frac{i}{\hbar} c \alpha_\ell \underbrace{[K_\ell, x_k]}_{\frac{\hbar}{i} \delta_{k\ell}} = c \alpha_\ell \delta_{k\ell} = c \alpha_k
\end{aligned}$$

Az erő operátor alakja:

$$F_j = \frac{d}{dt} K_j = \frac{i}{\hbar} [H, K_j] + \frac{\partial K_j}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} c \alpha_i \underbrace{[K_i, K_j]}_{-\frac{\hbar}{i} \varepsilon_{ijk} B_k} + \frac{i}{\hbar} q [\Phi, K_j] = \quad (9.132)$$

$$= -\underbrace{c \alpha_i}_{v_i} \varepsilon_{ijk} B_k - q(\nabla \Phi)_j - q \frac{\partial A_j}{\partial t} = -\underbrace{\varepsilon_{ijk} v_i B_k}_{-(\mathbf{v} \times \mathbf{B})_j} - q(\nabla \Phi)_j - q \frac{\partial A_j}{\partial t} = \quad (9.133)$$

$$= q(\mathbf{v} \times \mathbf{B})_j + qE_j \quad (9.134)$$

Vagyis épp a Lorentz erőt kapjuk.

9.4 Megoldás Tekintsük a szabad részecske Heisenberg-képbeli sebességoperátorának (9.132) alakját, és nézzük meg ennek az időderiváltját:

$$\frac{d}{dt} v_k = \frac{i}{\hbar} [H, v_k] = \frac{ic}{\hbar} [c\alpha_\ell p_\ell + \beta mc^2, \alpha_k] = \frac{ic}{\hbar} (c p_\ell [\alpha_\ell, \alpha_k] + mc^2 [\beta, \alpha_k]) \quad (9.135)$$

Az ebben megjelenő kommutátorok:

$$[\alpha_\ell, \alpha_k] = \alpha_\ell \alpha_k - \alpha_k \alpha_\ell = \alpha_\ell \alpha_k + \alpha_k \alpha_\ell - 2\alpha_k \alpha_\ell = 2\delta_{k\ell} I_2 - 2\alpha_k \alpha_\ell \quad (9.136)$$

$$[\beta, \alpha_k] = \beta\alpha_k - \alpha_k\beta = \beta\alpha_k + \alpha_k\beta - 2\alpha_k\beta = -2\alpha_k\beta \quad (9.137)$$

Tehát

$$\frac{d}{dt}v_k = \frac{ic}{\hbar} (cp_\ell (2\delta_{k\ell}I_2 - 2\alpha_k\alpha_\ell) - 2mc^2\alpha_k\beta) = \frac{2ic}{\hbar} \left(cp_k - \alpha_k \underbrace{(cp_\ell\alpha_\ell + mc^2\beta)}_H \right) \quad (9.138)$$

Tekintsük most a speciális relativitás impulzus és energia kifejezését:

$$\mathbf{p} = \frac{m\mathbf{V}}{\sqrt{1 - \frac{\mathbf{V}^2}{c^2}}}, \quad E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{\mathbf{V}^2}{c^2}}} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{V} = \frac{c^2\mathbf{p}}{E}, \quad (9.139)$$

ahol \mathbf{V} a relativisztikus részecske sebessége. Vezessük most be ennek mintájára a $\hat{V}_k = c^2\hat{p}_k\hat{H}^{-1}$ operátort, mely mivel csak \hat{p} -t és \hat{H} -t tartalmazza, kommutál \hat{H} -val, így időben állandó. Ezzel

$$\frac{d}{dt}v_k = \frac{d}{dt}(v_k - V_k) = -(v_k - V_k) \frac{2i}{\hbar}H \quad (9.140)$$

A differenciálegyenlet megoldása:

$$v_k(t) - V_k = (v_k(0) - V_k) e^{-i\frac{2H}{\hbar}t} \quad \Rightarrow \quad v_k(t) = V_k + (v_k(0) - V_k) e^{-i\Omega t}, \quad (9.141)$$

ahol bevezettük az $\Omega = \frac{2H}{\hbar}$ frekvencia dimenziójú operátort. A speciális relativitáselméletből egyszerűen csak $v_k = V_k$ -t várnánk, azonban a relativisztikus kvantummechanika ettől eltérő eredményt ad. A konstans tagra ráakódik egy Ω frekvenciával rezgő tag is. A koordináta operátort időbeli integrálással kapjuk:

$$x_k(t) = x_k(0) + V_k t + (v_k(0) - V_k) i\Omega^{-1} (e^{-i\Omega t} - 1), \quad (9.142)$$

ahol az egyenesvonalú egyenletes mozgást leíró első két tag mellett megjelent az Ω frekvenciájú rezgés, melyet Erwin Schrödinger nyomán „Zitterbewegung”-nak (remegve mozgás) nevezünk. Az Ω frekvencia értékére nagyságrendi becslést adhatunk, ha kis sebességek esetén az elektron energiáját a nyugalmi energiával $m_e c^2 = 511 \text{keV}$ közelítjük, így $\Omega = 10^{21} \text{Hz}$ -et kapunk, ami jelenleg kísérletileg nem mérhető tartomány. A Zitterbewegung amplitúdója pedig a következőképp becsülhető: $A \sim \frac{V}{\Omega} \sim \frac{\hbar}{mc} = \lambda_c \sim 10^{-13} \text{m} = 10^{-3} \text{Å}$, vagyis a hidrogénatom méretének ezrede, amely szintén a mérési lehetőségeinket meghaladó hosszskála. Megjegyezzük még, hogy a „zitterezést” adó tag várható értéke eltűnik kizárólag pozitív (elektron) vagy kizárólag negatív (pozitron) energiás energiasajátállapotokból kikevert állapotokban.

9.5 Megoldás Osszuk a tartományt 2 részre:

$$\begin{array}{ll} I : z < 0 & II : z > 0 \\ \\ E^2 = p^2 + m^2 c^4 & (E - V_0)^2 = p'^2 + m^2 c^4 \\ \downarrow & \downarrow \\ (c\alpha_3 p_z + \beta mc^2) \Psi = E \Psi & (c\alpha_3 p_z + \beta mc^2) \Psi = (E - V_0) \Psi \end{array} \quad (9.143)$$

Megjegyezzük, hogy $E - mc^2 < V_0 < E + mc^2$ esetén $p'^2 < 0$, tehát $p' = i\mathfrak{S}p'$. A balról beeső hullám Ψ_i :

$$\Psi_i = A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{pc}{E+mc^2} \\ 0 \end{pmatrix} e^{i\frac{pz}{\hbar}}, \quad (9.144)$$

ami teljesíti az I tartomány Dirac-egyenletét. Legyen a balra menő visszavert hullám Ψ_r , illetve a jobbra menő transzmittált Ψ_t . Keressük ezeket is síkhullám alakban:

$$\Psi_r = B \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{-pc}{E+mc^2} \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\frac{pz}{\hbar}} \quad \Psi_t = C \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p'c}{E-V_0+mc^2} \\ 0 \end{pmatrix} e^{i\frac{p'z}{\hbar}} \quad (9.145)$$

$z = 0$ -nál a hullámfüggvény folytonosságából a következő két egyenletet kapjuk:

$$\begin{cases} A + B = C \\ \frac{pc}{E+mc^2}A - \frac{pc}{E+mc^2}B = \frac{p'c}{E-V_0+mc^2}C \end{cases} \quad (9.146)$$

A második egyenletet továbbalakítva:

$$\frac{pc}{E+mc^2}(A - B) = \frac{p'c}{E - V_0 + mc^2}C = -\frac{p'c}{V_0 - E - mc^2}C \quad (9.147)$$

$$A - B = -\underbrace{\frac{p'}{p} \frac{E + mc^2}{V_0 - E - mc^2}}_r C \quad (9.148)$$

A peremfeltételekből azt kapjuk tehát, hogy

$$\begin{cases} A + B = C \\ A - B = -rC \end{cases} \quad (9.149)$$

Innen

$$\begin{cases} A = C \frac{1-r}{2} \\ B = C \frac{1+r}{2} \end{cases} \quad (9.150)$$

Azaz

$$\begin{cases} \frac{B}{A} = \frac{1+r}{1-r} \\ \frac{C}{A} = \frac{2}{1-r} \end{cases} \quad (9.151)$$

Ellenőrzésül a $j = c\Psi^\dagger \alpha_3 \Psi$ áramsűrűségek:

$$j_i = |A|^2 \frac{2pc^2}{E + mc^2}, \quad j_r = |B|^2 \frac{-2pc^2}{E + mc^2}, \quad j_t = |C|^2 \frac{2\Re p' c^2}{E - V_0 + mc^2} \quad (9.152)$$

Innen a (7.72) és (7.74) egyenletekben definiált reflexiós és transzmissziós együttható:

$$R = -\frac{j_r}{j_i} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{1+r}{1-r} \right|^2, \quad T = \frac{j_t}{j_i} = -\frac{|C|^2 \Re p'}{|A|^2 p} \frac{E + mc^2}{V_0 - E - mc^2} = -\frac{4\Re r}{|1-r|^2} \quad (9.153)$$

Vagyis

$$j_i + j_r = j_i \left(1 - \frac{|1+r|^2}{|1-r|^2} \right) = j_i \left(-\frac{4\Re r}{|1+r|^2} \right) = j_t \quad (9.154)$$

Vagy másképp írva

$$R + T = \left| \frac{1+r}{1-r} \right|^2 - \frac{4\Re r}{|1-r|^2} = 1 \quad (9.155)$$

Tehát teljesül a kontinuitási egyenlet. Alakítsuk r kifejezését tovább:

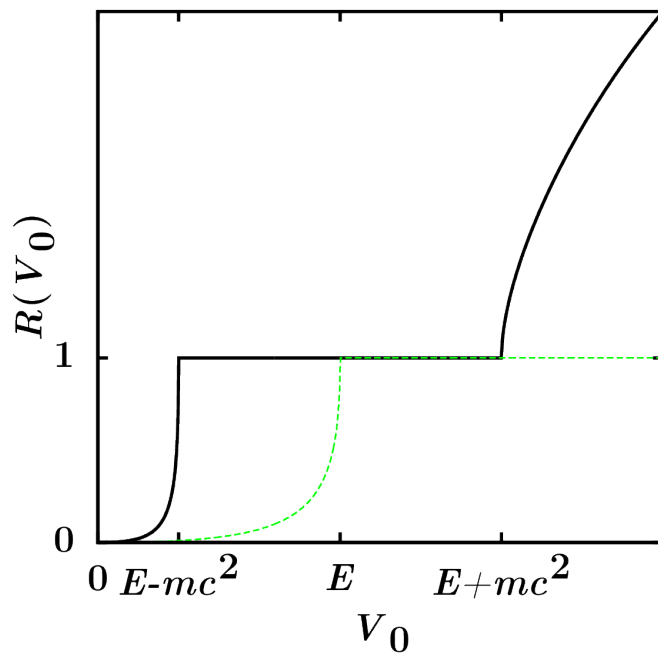
$$\begin{aligned} r &= \frac{p'}{p} \frac{E + mc^2}{V_0 - E - mc^2} = \sqrt{\frac{(V_0 - E)^2 - m^2 c^4}{E^2 - m^2 c^4}} \cdot \frac{E + mc^2}{V_0 - E - mc^2} = \\ &= \pm \sqrt{\frac{(V_0 - E)^2 - m^2 c^4}{E^2 - m^2 c^4}} \cdot \frac{(E + mc^2)^2}{(V_0 - E - mc^2)^2} = \pm \sqrt{\frac{[V_0 - (E - mc^2)](E + mc^2)}{[V_0 - (E + mc^2)](E - mc^2)}} \end{aligned}$$

V_0 különböző értékei mellett meghatározhatjuk r , R illetve T lehetséges értékeit, amelyeket a 9.1 táblázatban foglaltunk össze, R változása V_0 függvényében pedig a 9.1 ábrán látható.

	V_0	r	R	T
nincs szórás	0	-1	0	1
normál szórás	$0 < V_0 < E - mc^2$	$-1 < r < 0$	$0 < R < 1$	$0 < T < 1$
teljes visszaverődés	$V_0 = E - mc^2$	0	1	0
	$E - mc^2 < V_0 < E + mc^2$	ir_0	1	0
	$V_0 = E + mc^2$	0	1	0
magas lépcső	$E + mc^2 < V_0$	$r > \sqrt{\frac{E+mc^2}{E-mc^2}}$	$R > 1$	$T < 0$
végtelen lépcső	$V_0 \rightarrow \infty$	$\sqrt{\frac{E+mc^2}{E-mc^2}}$	$\left(\frac{\sqrt{E+mc^2} + \sqrt{E-mc^2}}{\sqrt{E+mc^2} - \sqrt{E-mc^2}} \right)^2$	$-\frac{4\sqrt{(E+mc^2)(E-mc^2)}}{(\sqrt{E+mc^2} - \sqrt{E-mc^2})^2}$

9.1. táblázat.

Az $E - mc^2 < V_0 < E + mc^2$ tartományban $p' = i\Im p'$, azaz a jobb oldalon egy exponenciálisan elhaló evaneszcens hullám van csak. Világos, hogy $V_0 > E + mc^2$ esetén $R > 1$. Ez úgy lehetséges, hogy ebben a tartományban olyan nagy energiájú a potenciálgát, hogy képes párkeltésre. Elektron-pozitron párok keletkezhetnek, így lehetséges, hogy több elektron verődik vissza, mint amennyi bement. Eközben pozitronok haladnak a potenciálgát alatt jobbra, így a transzmissziós együttható negatív.



9.1. ábra. Az R reflexiós együttható a V_0 függvényében relativisztikus (fekete folytonos vonal) és nem relativisztikus (zöld szaggatott vonal, lásd: 7.1 feladat)

Irodalomjegyzék

- [1] Apagyi Barnabás: Kvantummechanika (Műegyetemi Kiadó, Budapest, 1996).
- [2] F. Constantinescu és Eugen Magyari: Kvantummechanika, Feladatok (Tankönyvkiadó, Budapest, 1972).
- [3] Gálfi László, Rácz Zoltán: Elméleti Fizika Példatár 3. (Tankönyvkiadó, Budapest, 1983).
- [4] Petz Dénes: Lináris analízis (Akadémiai Kiadó, Budapest, 2002).
- [5] L. E. Ballentine: Quantum Mechanics: A modern development (World Scientific, Singapore, 1998).
- [6] A. Messiah: Quantum Mechanics I. & II. (Elsevier, Amsterdam, 1991).
- [7] L. D. Landau, E. M. Lifsic: Elméleti Fizika III. Kvantummechanika, Nemrelativisztikus elmélet (Tankönyvkiadó, Budapest, 1978).