

Kvantummechanika B

előadás fizika BSC hallgatóknak

Bene Gyula

docens

ELTE TTK Fizikai Intézet, Elméleti Fizikai Tanszék

2013. október 13.

Tartalomjegyzék

1. hét	5
1.1. Bevezetés. A kvantumelmélet jelentősége és eredményei.	5
1.2. A kvantumelmélet előzményei	5
1.2.1. Az anyag atomos szerkezete	5
1.2.2. Az elektron	7
1.2.3. Radioaktivitás	9
1.2.4. Az atomok szerkezete	9
1.2.5. Hőmérsékleti sugárzás és a hatáskvantum	11
1.2.6. A hatáskvantum első alkalmazásai. Hullámjelenségek részecsketulajdonságai .	16
1.2.7. Anyaghullámok	19
2. hét	20
2.1. A Bohr-elmélet	20
2.1.1. A Bohr-elmélet feltevései és alkalmazásuk a hidrogénatomra	22
2.1.2. A Sommerfeld-féle kvantumfeltételek	24
2.1.3. Az atomok mágneses nyomatéka	26
2.1.4. Az elektron spinje	28
2.1.5. A Pauli-elv. A periódusos rendszer kvalitatív értelmezése.	29
2.1.6. A korrespondencia-elv.	31
2.1.7. A Bohr-elmélet korlátai	31

3. hét	33
3.1. Fizikai mennyiségek mint operátorok és mérhető értékek mint sajátértékek	33
3.1.1. Operátorok és sajátértékek	33
3.1.2. A Heisenberg-féle felcserélési törvények	39
3.1.3. A lineáris harmonikus oszcillátor	41
3.1.4. Az impulzusmomentum	43
3.1.5. A rotátor	50
3.1.6. Centrális erőterben mozgó tömegpont energia-sajátértékei és sajátfüggvényei .	51
3.1.7. Merev falú gömbbe zárt tömegpont	51
3.1.8. Háromdimenziós potenciálvölgy	51
3.1.9. A hidrogénatom	51
4. hét	53
4.1. Fizikai állapot és dinamikája. A Schrödinger-egyenlet	53
4.1.1. A dinamikai egyenlet	53
4.1.2. Az állapotfüggvény fizikai jelentése	53
4.1.3. Stacionárius állapotok	54
4.1.4. A Heisenberg-féle határozatlansági összefüggések	55
4.1.5. A fizikai mennyiségek középértékének időbeli változása. Az Ehrenfest-tétel . .	58
4.1.6. Szabad tömegpont mozgásának kvantummechanikai leírása	59
4.1.7. A kvantummechanika kapcsolata a klasszikus mechanikával	60
5. hét	62
5.1. Az elektronspin nemrelativisztikus elmélete	62
5.1.1. Az impulzusmomentum sajátértékproblémájának algebrai megoldása	62
5.1.2. Az elektronspin operátora és sajátérték-egyenlete	64
5.1.3. Impulzusnyomatékok összeadása: a teljes impulzusnyomaték	65
5.1.4. Az elektromágneses térben mozgó elektron Hamilton-operátora	67
5.1.5. Az elektron állapotegyenlete. A Pauli-egyenlet	70
6. hét	72
6.1. Ütközések elmélete	72
6.1.1. A hatáskeresztmetszet	73
6.1.2. A parciális hullámok módszere	73
6.1.3. A kisenergiájú részecskék szóródása	73
6.1.4. A Born-közelítés	73
6.1.5. Rezonancia-jelenségek a részecskék ütközésénél	74
6.1.6. Alagút-jelenség	74

7. hét	75
7.1. Perturbációszámítás	75
7.1.1. Időfüggetlen perturbációszámítás	75
7.1.2. Időfüggetlen perturbációszámítás elfajulás esetén	77
7.1.3. Időfüggő perturbációszámítás	78
7.1.4. Elektromágneses sugárzás kölcsönhatása atomokkal	79
7.1.5. A törésmutató kvantumelmélete	80
8. hét	82
8.1. A kvantummechanikai többtestprobléma. Atomok és molekulák elmélete	82
8.1.1. Sok részecskéből álló kvantummechanikai rendszer leírása	82
8.1.2. Azonos részecskék és a Pauli-elv	83
8.1.3. A héliumatom	85
8.1.4. Közelítő módszerek atomok és molekulák energiaszintjeinek kiszámítására	86
8.1.5. Molekulák. A Born-Oppenheimer-közelítés	87
8.1.6. A hidrogén-molekula-ion (H_2^+)	89
8.1.7. A hidrogén-molekula	91
8.1.8. A kémiai kötés és a vegyérték	92
8.1.9. A van der Waals-erők	92
9. hét	94
9.1. Relativisztikus kvantummechanika. A Dirac-egyenlet	94
9.1.1. A speciális relativitáselmélet formalizmusa	94
9.1.2. Az elektron relativisztikus kvantummechanikai leírása: Dirac-egyenlet	95
9.1.3. Szabad részecske mozgása a Dirac-egyenlet alapján	100
9.1.4. A Dirac-egyenlet szimmetriái	102
9.1.5. Az elektron saját impulzusmomentuma (spinje)	103
9.1.6. Töltött részecske elektromágneses térben	103
9.1.7. Az elektron mágneses nyomatéka	103
9.1.8. A hidrogénatom energia-sajátértékei a Dirac-egyenlet alapján	103
9.1.9. Spin-pálya kölcsönhatás	103
10.hét	104
10.1. Az elektromágneses tér kvantumelmélete	104
10.1.1. A sugárzási tér alapegyenletei kanonikus alakban	104
10.1.2. A sugárzási tér kvantálása	104
10.1.3. Az elektromágneses sugárzási tér vákuum-ingadozása	104
10.1.4. Az elektromágneses sugárzás kölcsönhatása atomokkal	104

10.1.5. A színeképvonalak természetes szélessége	104
11.hét	105
11.1. Pályaintegrálok	105
11.1.1. A legkisebb hatás elve a klasszikus mechanikában	105
11.1.2. Átmeneti valószínűségi amplitudók	105
11.1.3. Pályaintegrál	105
11.1.4. Klasszikus határeset nyeregpont-módszerrel	105
11.1.5. Pályaintegrálok a kvantumtérelméletben	105
12.hét	106
12.1. A mérés szerepe a kvantummechanikában. A koppenhágai értelmezés. Kvantumparadoxonok. Dekoherencia.	106
12.1.1. A kvantummechanikai mérés posztulátumai és a koppenhágai értelmezés . . .	106
12.1.2. Leírható-e kvantummechanikailag a mérési folyamat?	106
12.1.3. Az Einstein-Podolsky-Rosen-paradoxon	106
12.1.4. A Bell-egyenlőtlenség	106
12.1.5. Schrödinger macskája: érvényes-e a szuperpozíció elve makroszkopikus rendszerekre?	106
12.1.6. Részrendszerek és a sűrűségmátrix	106
12.1.7. A Caldeira-Leggett-modell	106
12.1.8. Dekoherencia	106
13.hét	107
13.1. A kvantummechanika modern alkalmazási területei	107
13.1.1.	107
13.1.2.	107
13.1.3.	107
13.1.4.	107
13.1.5.	107
13.1.6.	107
13.1.7.	107
13.1.8.	107

1. hét

1.1. Bevezetés. A kvantumelmélet jelentősége és eredményei.

A modern fizika alapja. Atomfizika, szilárdtestfizika (anyagtudomány, lézer, tranzisztor, integrált áramkör, informatika, nanostruktúrák), kvantumkémia (gyógyszerkutatás, vegyipar), molekuláris biológia (sejtműködés, fehérjék, DNS, géntechnológia), magfizika (atombomba, atomerőmű, fúziós reaktor, csillagok energiatermelése), részecskefizika (az anyag ma ismert legegyszerűbb szerkezete, standard modell, részecskegyorsítók, kozmológia és asztrofizika).

1.2. A kvantumelmélet előzményei

1.2.1. Az anyag atomos szerkezete

Dalton törvénye (többszörös súlyviszonyok törvénye).

Faraday törvényei:

$$m = \frac{1}{96485} \frac{QM}{n}$$

$$(q_e N_A = 1.602 \times 10^{-19} C \times 6.022 \times 10^{23} = 96485 C)$$

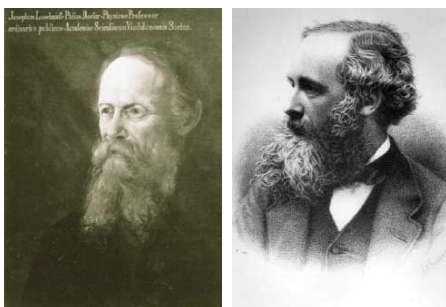


1. ábra. John Dalton (1766-1844) és Michael Faraday (1791-1867)

Kinetikus gázelmélet. A molekulák méretének és az Avogadro-számnak a meghatározása (Loschmidt, 1865, Maxwell, 1870): Gázok diffúziós együtthatóinak méréséből meghatározható az l szabad úthossz, melyre

$$l \propto \frac{1}{na}$$

érvényes, ahol $a = \pi R^2$ a molekula keresztmetszete, n a térfogategységben levő molekulák száma. Ha a gázt cseppfolyósítják, meghatározható, hogy ugyanennyi össztömegű molekula mekkora teret tölt ki: szoros illeszkedést feltéve $v = V_f/V_g \propto nR^3 \propto R/l$. Ebből $R \propto v l$, az Avogadro-szám pedig $N_A = nV_{mol} \propto V_{mol}/(l^3 v^2)$.



2. ábra. Johann Joseph Loschmidt (1821-1895) és James Clerk Maxwell (1831-1879)

Statisztikus mechanika. A termodinamika törvényeinek levezetése a molekulákra alkalmazott klasszikus mechanika alapján.



3. ábra. Ludwig Eduard Boltzmann (1844-1906)

Brown mozgás. Einstein-Smoluchowski-elmélet. Perrin kísérletei.

$$\langle |\mathbf{r}(t + \tau) - \mathbf{r}(t)|^2 \rangle = 2dD\tau$$

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta r}$$

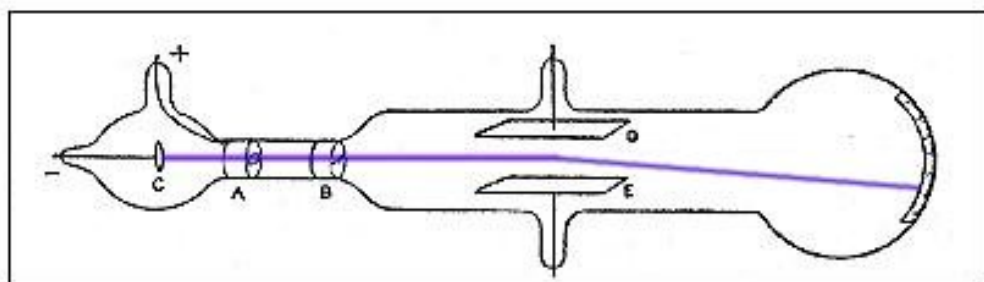


4. ábra. Albert Einstein (1879-1955), Marian Smoluchowski (1872-1917) és Jean Baptiste Perrin (1870-1942)

1.2.2. Az elektron

Az elektron felfedezése és fajlagos töltésének meghatározása (Thomson-kísérlet, 1897).

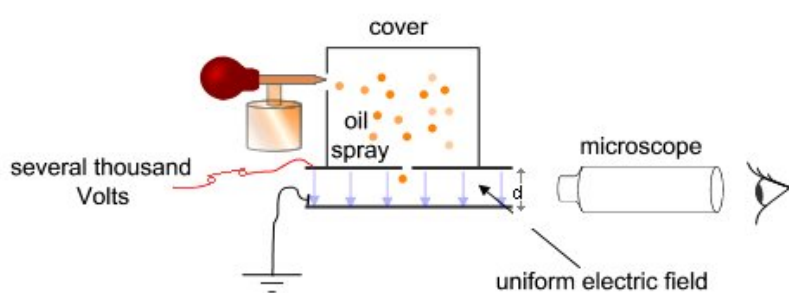
$$\frac{e}{m} = -1.759 \times 10^{11} \frac{C}{kg}$$



5. ábra. A Thomson-kísérlet vázlata és Joseph John Thomson (1856-1940)

Az elektron töltésének meghatározása (Millikan-kísérlet, 1913).

$$e = -1.602 \times 10^{-19} C$$



6. ábra. A Millikan-kísérlet vázlata és Robert Millikan (1868-1953)

1.2.3. Radioaktivitás

α , β , γ sugárzás.



7. ábra. Henri Becquerel (1852-1908), Marie Curie (1867-1934) és Pierre Curie (1859-1906)

1.2.4. Az atomok szerkezete

Thomson-modell. Lénárd kísérletei. Rutherford-szórás.

Zq_e töltésű atommagon $E = \frac{m}{2}v_0^2$ energiájú, $2q_e$ töltésű α -részecskék szóródnak. Feltéve, hogy a szóró atommag pontszerű és tömege sokkal nagyobb, mint az α -részé,

$$E = \frac{m}{2}v_0^2 = \frac{m}{2}\dot{r}^2 + \frac{mr^2}{2}\dot{\phi}^2 + \frac{2Zq_e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

fejezi ki az energiamegmaradást és

$$J = mbv_0 = mr^2\dot{\phi}$$

az impulzusmomentum-megmaradást.

Ebből

$$\dot{r} = \sqrt{\frac{2}{m} \left(E - \frac{2Zq_e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{Eb^2}{r^2} \right)}$$

$$\dot{\phi} = \frac{1}{r^2} b \sqrt{\frac{2E}{m}}$$

amiből a pálya differenciálegyenlete

$$\frac{dr}{d\phi} = r^2 \sqrt{\frac{1}{b^2} - \frac{2Zq_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{Eb^2} \frac{1}{r} - \frac{1}{r^2}}$$

Ennek megoldása

$$\phi = \pi - 2 \int_0^{1/r_{min}} \frac{dx}{\sqrt{\frac{1}{b^2} - \frac{2Zq_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{Eb^2} x - x^2}}$$

azaz

$$\operatorname{ctg}^2 \frac{\phi}{2} = 1 + \frac{16\pi^2 \epsilon_0^2 E^2}{Z^2 q_e^4} b^2$$

Differenciális szórási hatáskeresztmetszet:

$$\frac{d\sigma}{d\phi} = 2\pi b \left| \frac{db}{d\phi} \right| = \frac{Z^2 q_e^4}{16\pi \epsilon_0^2 E^2} \frac{\cos \frac{\phi}{2}}{\sin^3 \frac{\phi}{2}}$$

Ha A keresztmetszetű nyaláb esik h vastagságú céltárgyra (vékony lemez), melyben térfogategységenként N atom van,

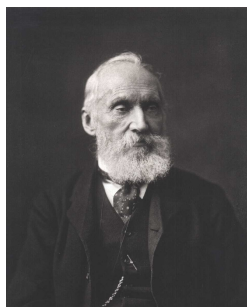
$$\Delta n = n \frac{(NAh)d\sigma}{A} = nNh \frac{d\sigma}{d\phi} d\phi$$

számú α -részecske szóródik $\phi \pm \frac{d\phi}{2}$ szögben.



8. ábra. Ernest Rutherford (1871-1937)

1.2.5. Hőmérsékleti sugárzás és a hatáskvantum



9. ábra. William Thomson, Lord Kelvin (1824-1907)

„Nineteenth-Century Clouds over the Dynamical Theory of Heat and Light” (Lord Kelvin, 1900)

Kirchoff törvénye: Hőmérsékleti egyensúlyban lévő test abszorpciós és emissziós együtthatóinak aránya a hőmérséklet és a frekvencia univerzális függvénye.

Abszolút fekete test: minden ráeső sugárzást elnyel (az abszorpciós együttható értéke 1).

Wien-féle eltolódási törvény: $\lambda_{max}T = 2.898 \times 10^6 \text{ nm K}$

Stefan-Boltzmann-törvény: abszolút fekete test sugárzásának intenzitása (energiaáram-sűrűsége)
 $j_E = \sigma T^4$, ahol $\sigma = 5.6704 \times 10^{-8} \frac{\text{J}}{\text{m}^2 \text{ s K}^4}$



10. ábra. Gustav Robert Kirchhoff (1824-1887), Wilhelm Wien (1864-1928) és Jožef Stefan (1835-1893)

A feketetest-sugárzás elméleti tárgyalása

Elektromágneses sugárzás l oldalélű kocka alakú üregben:
Maxwell-egyenletek az üreg belsejében:

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{B} &= \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \nabla \cdot \mathbf{E} &= 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0\end{aligned}$$

Ebből következik, hogy

$$\begin{aligned}\Delta \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} &= 0, & \nabla \cdot \mathbf{E} &= 0 \\ \Delta \mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} &= 0, & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0\end{aligned}$$

Határfeltételek: az elektromos tér tangenciális komponense és a mágneses indukció normális komponense eltűnik a falakon.

$$\begin{aligned}E_x = 0, & \quad \text{ha} \begin{cases} y = 0 & \text{vagy} & y = l \\ z = 0 & \text{vagy} & z = l \end{cases}; & \quad B_x = 0, & \quad \text{ha} \quad x = 0 & \text{vagy} & x = l. \\ E_y = 0, & \quad \text{ha} \begin{cases} z = 0 & \text{vagy} & z = l \\ x = 0 & \text{vagy} & x = l \end{cases}; & \quad B_y = 0, & \quad \text{ha} \quad y = 0 & \text{vagy} & y = l. \\ E_z = 0, & \quad \text{ha} \begin{cases} x = 0 & \text{vagy} & x = l \\ y = 0 & \text{vagy} & y = l \end{cases}; & \quad B_z = 0, & \quad \text{ha} \quad z = 0 & \text{vagy} & z = l.\end{aligned}$$

Az egyenleteknek a határfeltételeket kielégítő legáltalánosabb megoldása

$$\begin{aligned}E_x &= \sum_{n_x=1}^{\infty} \sum_{n_y=1}^{\infty} \sum_{n_z=1}^{\infty} q_{x,\mathbf{n}}(t) \cos\left(n_x \pi \frac{x}{l}\right) \sin\left(n_y \pi \frac{y}{l}\right) \sin\left(n_z \pi \frac{z}{l}\right), \\ E_y &= \sum_{n_x=1}^{\infty} \sum_{n_y=1}^{\infty} \sum_{n_z=1}^{\infty} q_{y,\mathbf{n}}(t) \sin\left(n_x \pi \frac{x}{l}\right) \cos\left(n_y \pi \frac{y}{l}\right) \sin\left(n_z \pi \frac{z}{l}\right), \\ E_z &= \sum_{n_x=1}^{\infty} \sum_{n_y=1}^{\infty} \sum_{n_z=1}^{\infty} q_{z,\mathbf{n}}(t) \sin\left(n_x \pi \frac{x}{l}\right) \sin\left(n_y \pi \frac{y}{l}\right) \cos\left(n_z \pi \frac{z}{l}\right),\end{aligned}$$

és

$$B_x = \sum_{n_x=1}^{\infty} \sum_{n_y=1}^{\infty} \sum_{n_z=1}^{\infty} \frac{l(n_y \dot{q}_{z,\mathbf{n}}(t) - n_z \dot{q}_{y,\mathbf{n}}(t))}{\pi c^2 \mathbf{n}^2} \sin\left(n_x \pi \frac{x}{l}\right) \cos\left(n_y \pi \frac{y}{l}\right) \cos\left(n_z \pi \frac{z}{l}\right),$$

$$B_y = \sum_{n_x=1}^{\infty} \sum_{n_y=1}^{\infty} \sum_{n_z=1}^{\infty} \frac{l(n_z \dot{q}_{x,\mathbf{n}}(t) - n_x \dot{q}_{z,\mathbf{n}}(t))}{\pi c^2 \mathbf{n}^2} \cos\left(n_x \pi \frac{x}{l}\right) \sin\left(n_y \pi \frac{y}{l}\right) \cos\left(n_z \pi \frac{z}{l}\right),$$

$$B_z = \sum_{n_x=1}^{\infty} \sum_{n_y=1}^{\infty} \sum_{n_z=1}^{\infty} \frac{l(n_x \dot{q}_{y,\mathbf{n}}(t) - n_y \dot{q}_{x,\mathbf{n}}(t))}{\pi c^2 \mathbf{n}^2} \cos\left(n_x \pi \frac{x}{l}\right) \cos\left(n_y \pi \frac{y}{l}\right) \sin\left(n_z \pi \frac{z}{l}\right),$$

ha

$$\mathbf{n} \mathbf{q}_{\mathbf{n}} = 0$$

(transzverzális hullámok). Emiatt módusonként két független amplitudó van:

$$\mathbf{q}_{\mathbf{n}}(t) = q_{\mathbf{n}}^{(1)}(t) \mathbf{e}_{\mathbf{n}}^{(1)} + q_{\mathbf{n}}^{(2)}(t) \mathbf{e}_{\mathbf{n}}^{(2)}$$

Itt $\mathbf{e}_{\mathbf{n}}^{(r)}$ -ek ($r=1,2$) a polarizációs egységvektorok:

$$\mathbf{n} \mathbf{e}_{\mathbf{n}}^{(r)} = 0, \quad \mathbf{e}_{\mathbf{n}}^{(r)} \mathbf{e}_{\mathbf{n}}^{(s)} = \delta_{rs}$$

A $q_{\mathbf{n}}^{(r)}(t)$ amplitudók a harmonikus oszcillátor mozgásegyenletét elégítik ki:

$$\ddot{q}_{\mathbf{n}}^{(r)}(t) + \omega_{\mathbf{n}}^2 q_{\mathbf{n}}^{(r)}(t) = 0$$

ahol

$$\omega_{\mathbf{n}} = \frac{\pi c}{l} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$$

a rezgés körfrekvenciája.

A sugárzás teljes energiája

$$U = \int dV \left(\frac{\epsilon_0}{2} \mathbf{E}^2 + \frac{\epsilon_0 c^2}{2} \mathbf{B}^2 \right) = \sum_{\mathbf{n}} \sum_{r=1}^2 \frac{l^3 \epsilon_0}{16 \omega_{\mathbf{n}}^2} (\dot{q}_{\mathbf{n}}^{(r)2}(t) + \omega_{\mathbf{n}}^2 q_{\mathbf{n}}^{(r)2}(t))$$

A klasszikus statisztikus mechanika szerint egy ilyen rendszerre alkalmazható lenne az ekvipartíció tétele: minden négyzetes taghoz (szabadsági fok) $\frac{k_B T}{2}$ energia tartozna. A végtelen számú módusra összegezve így azonban végtelent kapnánk az energiára: ez az ún. „ultraibolya katasztrófa”.

Adott frekvenciájú módusok száma (minden frekvenciához két módus tartozik, amelyek egymásra merőleges polarizációjúak):

$$2d^3\mathbf{n} \rightarrow 2\frac{1}{8}4\pi n^2 dn = \frac{l^3}{\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega = \frac{8\pi l^3}{c^3} \nu^2 d\nu$$

Ha az ekvipartíció tétele érvényes volna, akkor a spektrális sűrűség

$$u(\nu) = \frac{8\pi}{c^3} k_B T \nu^2$$

lenne (Rayleigh-Jeans-törvény). Ez kis frekvenciákon jó közelítést ad, de nagy frekvenciákon hibás.

Kvantumhipotézis (Planck, 1900)

Az oszcillátorok energiája nem folytonosan változik, hanem mindig egy diszkrét érték egész számú többszöröse, amely pedig arányos a frekvenciával:

$$U_j(\nu) = j h\nu \quad j = 0, 1, 2, 3, \dots$$

A $h = 6.62 \times 10^{-34} Js$ mennyiség (Planck-állandó vagy hatáskvantum) új természeti állandó.



11. ábra. Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858-1947)

Adott frekvenciájú oszcillátor energiájának várható értéke (átlaga):

$$\bar{U}(\nu) = \frac{\sum_{j=0}^{\infty} j h\nu e^{-\frac{j h\nu}{k_B T}}}{\sum_{j=0}^{\infty} e^{-\frac{j h\nu}{k_B T}}} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

Kis frekvenciákra ez $k_B T$ -hez tart (ekvipartíció), nagy frekvenciákra azonban exponenciálisan tart nullához.

Ennek segítségével a spektrálsűrűség (Planck-törvény):

$$u(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

Teljes energiasűrűség:

$$u = \int_0^{\infty} u(\nu) d\nu = \frac{8\pi^5 k_B^4}{15h^3 c^3} T^4$$

Egyezik a Stefan-Boltzmann-törvénnyel!

Hol van a spektrum maximuma?

$$\frac{du(\nu)}{d\nu} = \frac{d}{d\nu} \left(\frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} \right) = 0$$

Ebből

$$3(e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1) - \frac{h\nu}{k_B T} e^{\frac{h\nu}{k_B T}} = 0$$

Az egyenlet gyöke

$$\frac{h\nu_m}{k_B T} = 2.82\dots$$

Wien-féle eltolódási törvény.

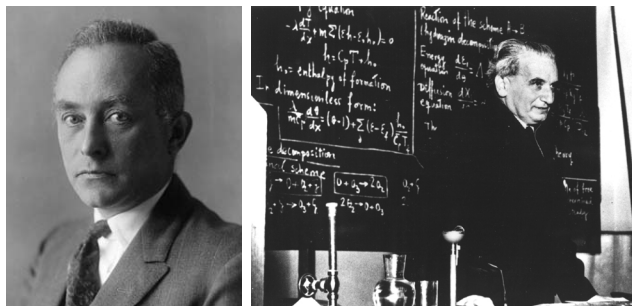
1.2.6. A hatáskvantum első alkalmazásai. Hullámjelenségek részecsketulajdonságai

Szilárdtestek fajhője.

Klasszikus statisztikus fizika: Dulong-Petit-szabály (szilárd anyagok fajhője $3k_B$). Valójában - összhangban a termodinamika III. főtételeivel - a fajhő alacsony hőmérsékleten nullához tart. Magyarázat: a rácsrezgések energiája kvantált (fononok). Emiatt egy ν frekvenciájú oszcillátor energiája T hőmérsékleten nem $k_B T$, hanem

$$\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

Figyelembe véve a rácsrezgések spektrumát, ebből alacsony hőmérsékleten $U \propto T^4$ következik, tehát a fajhő $c = \frac{1}{N} \frac{dU}{dT} \propto T^3$. (Max Born és Kármán Tódor, 1913).



12. ábra. Max Born (1882-1970) és Kármán Tódor (1881-1963)

Fotonok. A fényelektromos jelenség.

Fényelektromos jelenség: ultraibolya fény hatására alkálifémekből elektronok lépnek ki. A klasszikus elektrodinamika alapján a jelenség nem magyarázható (a klasszikus elmélet szerint napokba telne, míg az elektron a szükséges energiát összegyűjti, míg valójában a kilépés azonnal bekövetkezik).

Lénárd kísérletei: a kilépő elektronok sebességét a fény frekvenciája, számukat a fény intenzitása határozza meg.

Einstein magyarázata a fotonkép segítségével.

Foton: $h\nu$ energia, $\frac{h}{\lambda}$ impulzus.

$$h\nu = A + \frac{1}{2}mv^2$$

A: kilépési munka



13. ábra. Lénárd Fülöp (Philipp Eduard Anton Lenard, 1862-1947) és Albert Einstein (1879-1955)

Compton-effektus.

Grafitra eső röntgensugárzás hullámhossza megváltozik a szórás szögétől függően. Magyarázat: a fotonok az elektronokkal rugalmasan ütköznek és ennek során energiájuk és impulzusuk megváltozik.

Impulzusmegmaradás:

$$p_f = p'_f \cos \phi + p_e \cos \theta$$
$$p'_f \sin \phi = p_e \sin \theta$$

Energiamegmaradás:

$$p_f c + m_e c^2 = p'_f c + \sqrt{m_e^2 c^4 + p_e^2 c^2}$$

A fentiekből

$$m_e c (p_f - p'_f) = p_f p'_f (1 - \cos \phi)$$

adódik, azaz ($\lambda = h/p$ miatt)

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \phi)$$



14. ábra. Arthur Holly Compton (1892-1962)

1.2.7. Anyaghullámok

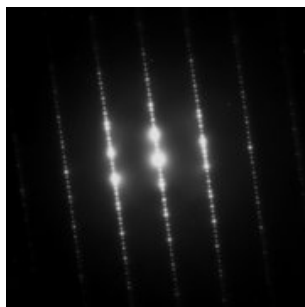
de Broglie: A hullámtulajdonságokkal (diffrakció) rendelkező fény oszthatatlan részecskéként viselkedhet. Fordítva, a részecsketulajdonságokkal rendelkező elektron is viselkedhet hullámként. Hullámhossz:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Frekvencia:

$$\nu = \frac{E}{h}$$

Davisson-Germer kísérlet: lassú elektronok nikkeltálcán diffrakciót szenvednek. A diffrakciós képből a hullámhossz meghatározható, és az teljes összhangban van de Broglie elméletével.



15. ábra. Eletrondiffrakciós kép transzmissziós elektronmikroszkópban

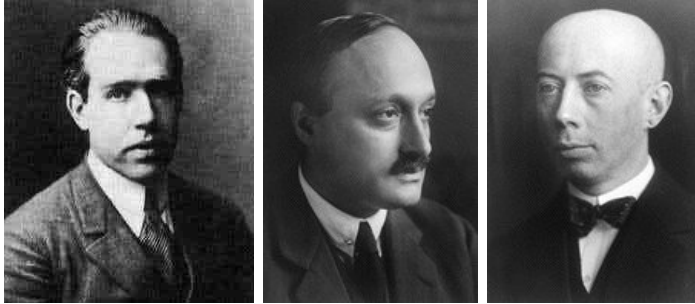


16. ábra. Prince Louis-Victor Pierre Raymond de Broglie (1892-1987), Clinton Joseph Davisson (1881-1958) és George Paget Thomson (1892-1975)

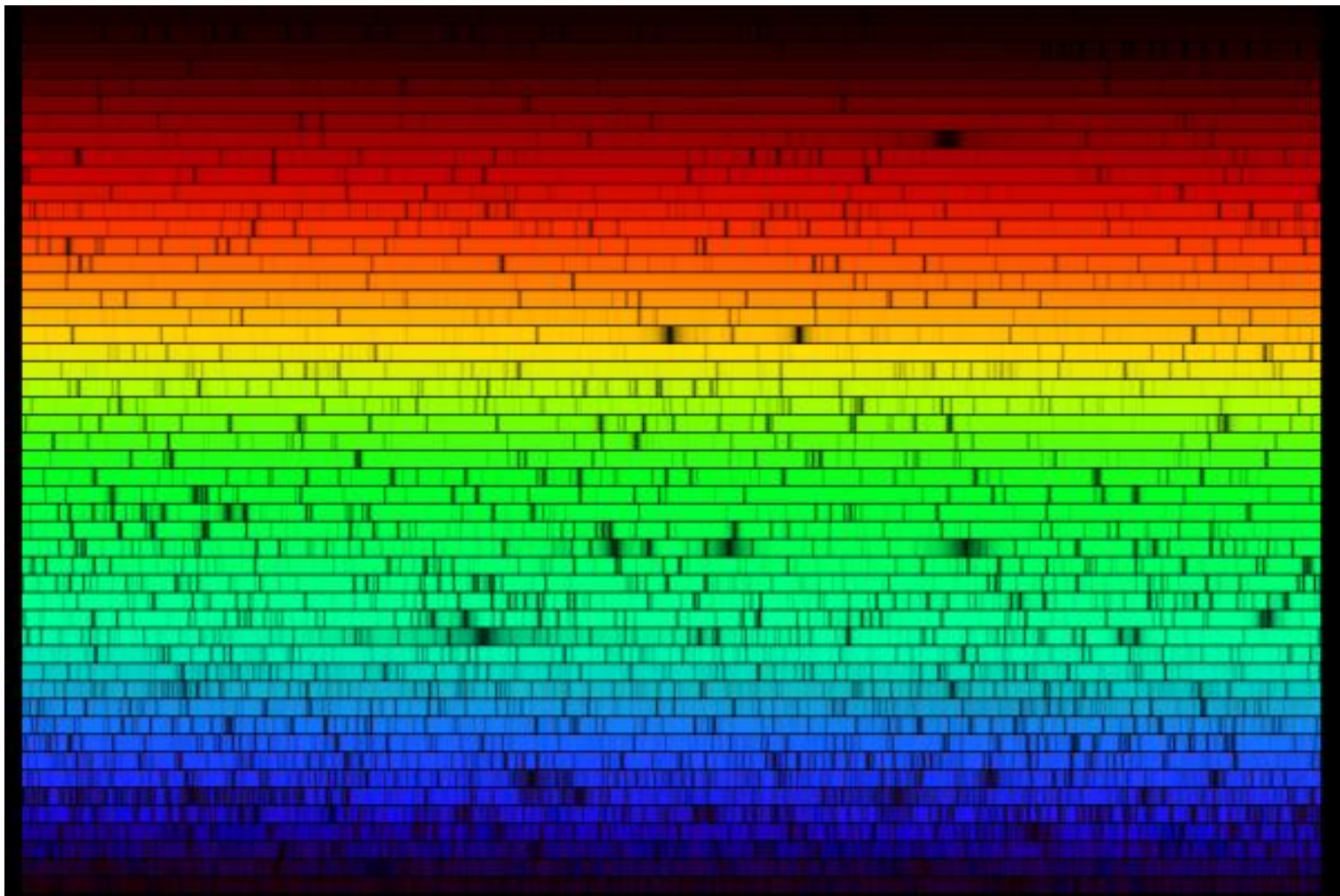
2. hét

2.1. A Bohr-elmélet

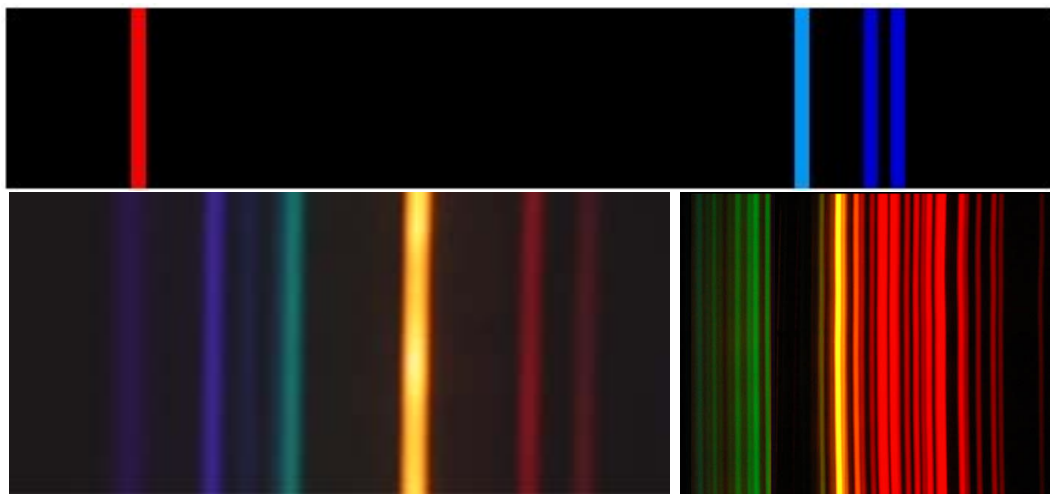
Vonalas színekép. Bohr-modell. Franck-Hertz-kísérlet.



17. ábra. Niels Bohr (1885-1962), James Franck (1882-1964) és Gustav Ludwig Hertz (1882-1975)



18. ábra. A Nap abszorpciós színeképe



19. ábra. A hidrogén, a hélium és a neon emissziós színeképe

2.1.1. A Bohr-elmélet feltevései és alkalmazásuk a hidrogénatomra

1. Csak azok a pályák megengedettek, melyeknek az impulzuszmomentuma $\hbar = h/(2\pi)$ egész számú többszöröse.

$$m_e v r = n\hbar$$

2. A megengedett pályán keringő elektron nem bocsájt ki sugárzást. Sugárzás akkor következik be, ha az elektron magasabb energiájú megengedett pályáról alacsonyabb energiájú megengedett pályára ugrik.

3. Frekvenciafeltétel:

$$E_k - E_v = h\nu$$

Alkalmazás a hidrogénatomra:

$$m_e \frac{v^2}{r} = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{q_e^2 m_e} n^2$$

$$E = \frac{1}{2}m_e v^2 - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{q_e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

$$E_n = -\frac{q_e^4 m_e}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

$$\nu_{n,n'} = \frac{q_e^4 m_e}{64\pi^3 \epsilon_0^2 \hbar^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)$$

Rydberg-állandó

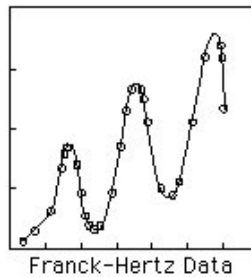
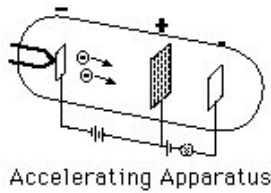
$$R = \frac{q_e^4 m_e}{64\pi^3 \epsilon_0^2 \hbar^2}$$

Pontosabb érték a redukált tömeggel:

$$m'_e = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{m_m}}$$

$$R' = \frac{R}{1 + \frac{m_e}{m_m}}$$

Franck-Hertz-kísérlet: higanygőzzel töltött katódsugárcsőben az atomi energiaszintek közti különbségeknek megfelelő anódfeszültségeknél rugalmatlan szórás következik be és az anódáram lecsökken.



*Nobel prize
in physics,
1925

20. ábra. A Franck-Hertz-kísérlet vázlata

2.1.2. A Sommerfeld-féle kvantumfeltételek

A spektrum finomszerkezete: a színeképvonalak valójában több közeli vonalból állnak.

Ellipszispályák kvantálása (Sommerfeld):

Kanonikus impulzusok:

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} ; \quad p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}}$$

Itt L a Lagrange-függvény:

$$L = \frac{m_e}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) + \frac{Zq_e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Sommerfeld-féle kvantumfeltételek:

$$\oint p_r dr = n_r h$$

$$\oint p_\phi d\phi = k h$$

n_r : radiális kvantumszám, k : azimutális kvantumszám.

Mellékkvantumszám:

$$l = k - 1$$

Alkalmazás hidrogénatomra:

$$p_r = m_e \dot{r}$$

$$p_\phi = m_e r^2 \dot{\phi}$$

$$E = -cRh \frac{1}{(n_r + k)^2}$$

Főkvantumszám:

$$n = n_r + k$$

Az ellipszisek féltengelyei:

$$a = n^2 \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e q_e^2}$$

$$b = a \frac{k}{n}$$

$k = 0$ nem megengedett (magba esés).

Ebből még nem következik a finomszerkezet. Azt relativisztikus effektusok okozzák (ideértve a spin-pálya kölcsönhatást és a potenciális energia relativisztikus korrekcióját is).

$$\left(E + \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)^2 - p^2 c^2 = m_e^2 c^4$$

$$E - m_e c^2 = \sqrt{m_e^2 c^4 + p^2 c^2} - m_e c^2 - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \approx \frac{p^2}{2m_e} - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{p^4}{8m_e^3 c^2}$$

A relativisztikus korrekció megszünteti az elfajulást, és az energia függni fog a mellékkvantumszámtól. Az első korrekció nagyságrendje:

$$-\frac{p^4}{8m_e^3 c^2} \approx \alpha \frac{E_n}{4n^2}$$

Finomszerkezeti állandó:

$$\alpha = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

A térbeli helyzet teljes megadásához három kvantumfeltétel szükséges:

$$L = \frac{m_e}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\psi}^2) + \frac{Z q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$p_r = m_e \dot{r}$$

$$p_\theta = m_e r^2 \dot{\theta}$$

$$p_\psi = m_e r^2 \sin^2 \theta \dot{\psi}$$

$$\oint p_r dr = n_r h$$

$$\oint p_\theta d\theta = n_\theta h$$

$$\oint p_\psi d\psi = m h$$

Mivel ψ ciklikus koordináta, p_ψ , az impulzuszmomentum z komponense mozgásállandó, ezért

$$p_\psi = m \frac{h}{2\pi} = m \hbar$$

$$m : -k, \dots, -1, 0, 1, \dots, k$$

(a Bohr-elméletnek ez a következtetése pontatlan!) Adott n és k esetén $2k + 1$ térbeli helyzet.lehetséges.

$$k = n_\theta + |m|$$

$$n = n_r + n_\theta + |m|$$



21. ábra. Arnold Sommerfeld (1868-1951)

2.1.3. Az atomok mágneses nyomatéka

\mathbf{n} normálvektorú A területet határoló görbe mentén folyó I áram mágneses momentuma

$$\mathbf{M} = A I \mathbf{n}$$

Atomi pálya esetén

$$I = \frac{q_e}{T} = \frac{q_e v}{2\pi r}$$

ezért a mágneses momentum nagysága

$$|\mathbf{M}| = \frac{q_e v \pi r^2}{2\pi r} = \frac{q_e m_e v r}{2 m_e} = \frac{q_e}{2 m_e} m \hbar$$

Vektoriális alakban:

$$\mathbf{M} = -\frac{q_e}{2 m_e} \mathbf{N}$$

ahol \mathbf{N} az impulzusmomentum.

Bohr-magneton:

$$\mu_B = \frac{q_e \hbar}{2 m_e}$$

A színekvonalak felhasadása mágneses térben (Zeeman-effektus):

$$U_m = -\mathbf{M}\mathbf{B}$$

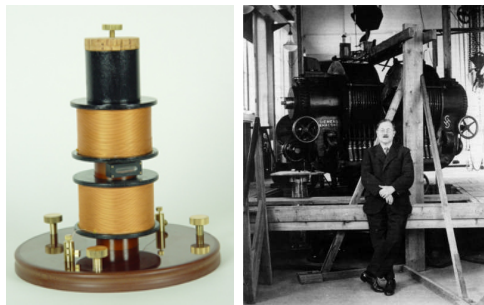
$$E_{n,m} = -\frac{R h c}{n^2} - \frac{q_e \hbar B}{2 m_e} m$$



22. ábra. Pieter Zeeman (1865-1943)

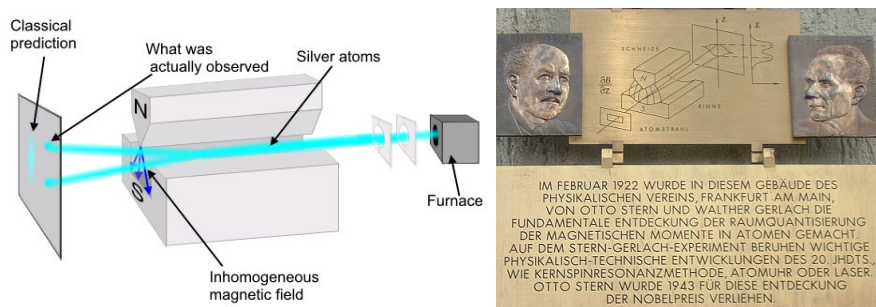
2.1.4. Az elektron spinje

Einstein-de Haas-effektus (1915).



23. ábra. Kísérleti berendezés az Einstein-de Haas effektus mérésére, Wander Johannes de Haas (1878-1960)

A mágneses momentum kvantáltsága (Stern-Gerlach-kísérlet, 1922).



24. ábra. a Stern-Gerlach-kísérlet vázlata, Otto Stern (1888-1969) és Walther Gerlach (1889-1979)

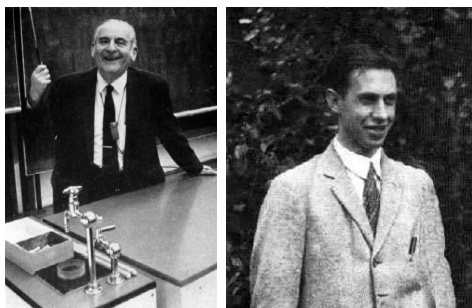
Inhomogén mágneses térben a mágneses dipólra erő hat:

$$F = \nabla(MB)$$

A Stern-Gerlach-kísérlet további jelentősége: Rabi-oszcillációk, mágneses magrezonancia, NMR tomográfia, atomóra, mézer

Stern-Gerlach-kísérlet ezüsttel (1922) és hidrogénnel (1927): az atomnyaláb *két* sugárra válik szét.

Magyarázat (Goudsmit és Uhlenbeck, 1926): az elektronnak $\hbar/2$ nagyságú saját impulzusmomentuma van.



25. ábra. Samuel Abraham Goudsmit (1902-1978) és George Eugene Uhlenbeck (1900-1988)

2.1.5. A Pauli-elv. A periódusos rendszer kvalitatív értelmezése.

Az atomi elektronoknak létezik egy negyedik kvantumszáma és egy atomon belül két elektronnak nem lehet mind a négy kvantumszáma azonos (kizárási elv, 1925).

A spin felfedezése után a negyedik kvantumszámot a spinnel azonosították. Főkvantumszám: $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$ (K, L, M, N, O, P, Q), mellékvantumszám: $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ (s,p,d,f,g), mágneses kvantumszám: $m = -l, \dots, 0, 1, \dots, l$, spinkvantumszám: $s = \pm \frac{1}{2}$.



26. ábra. Wolfgang Ernst Pauli (1900-1958)

Periódusos rendszer (Mengelejev, 1869).

Hidrogénatom alapállapota: egy elektron az 1s állapotban.

Héliumatom: két elektron (ellentétes spinnel) az 1s állapotban (jelölés: $1s^2$).

Lítium: $1s^2 2s^1$

Berillium: $1s^2 2s^2$

Bór: $1s^2 2s^2 2p^1$

PERIÓDUS CSOPORT	s-elemek		AZ ELEMEK PERIÓDUSOS RENDSZERE																p-elemek											
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	VIII	VIII	I	II	III	IV	V	VI	VII	0												
K	1 1,01 H 1 Hidrogén		relatív atomtömeg ——— 26,98 vegyjel ——— Al ³ ₈ ² rendszám ——— 13 — az elektronok eloszlása az energiaszinteken Alumínium																					4,00 2 He 2 Hélium						
L	2 6,94 3 Li 2 Lítium	9,01 4 Be 2 Berillium																	10,81 5 B 2 Bór	12,01 6 C 2 Szén	14,01 7 N 5 Nitrogén	16,00 8 O 2 Oxigén	19,00 9 F 7 Fluor	20,18 10 Ne 8 Neon						
M	3 22,99 11 Na 2 Nátrium	24,31 12 Mg 2 Magnézium																							26,98 13 Al 2 Alumínium	28,09 14 Si 2 Szilícium	30,97 15 P 2 Foszfor	32,07 16 S 2 Kén	35,45 17 Cl 2 Klór	39,95 18 Ar 2 Argon
N	4 39,10 19 K 2 Kálium	40,08 20 Ca 2 Kalcium	44,96 21 Sc 2 Szkandium	47,90 22 Ti 2 Titán	50,94 23 V 2 Vanádium	52,00 24 Cr 2 Krom	54,94 25 Mn 2 Mangán	55,85 26 Fe 2 Vas	58,93 27 Co 2 Kobalt	58,71 28 Ni 2 Nikkel	63,55 29 Cu 2 Réz	65,39 30 Zn 2 Cink	69,72 31 Ga 2 Gallium	72,59 32 Ge 2 Germánium	74,92 33 As 2 Arzén	78,96 34 Se 2 Szelén	79,90 35 Br 2 Brom	83,80 36 Kr 2 Kripton												
O	5 85,47 37 Rb 2 Rubídium	87,62 38 Sr 2 Stroncium	88,91 39 Y 2 Ittrium	91,22 40 Zr 2 Cirkónium	92,91 41 Nb 2 Niobium	95,94 42 Mo 2 Molibdén	98,91 43 Tc 2 Technécium	101,07 44 Ru 2 Ruténium	102,91 45 Rh 2 Ródium	106,4 46 Pd 2 Palládium	107,87 47 Ag 2 Ezüst	112,41 48 Cd 2 Kadmium	114,82 49 In 2 Indium	118,71 50 Sn 2 Ón	121,75 51 Sb 2 Antimon	127,60 52 Te 2 Tellúr	126,90 53 I 2 Jód	131,30 54 Xe 2 Xenon												
P	6 132,91 55 Cs 2 Cézium	137,33 56 Ba 2 Bárium	57-71	178,49 72 Hf 2 Háfium	180,95 73 Ta 2 Tantál	183,85 74 W 2 Volfrám	186,21 75 Re 2 Rénium	190,2 76 Os 2 Ozmium	192,22 77 Ir 2 Iridium	195,09 78 Pt 2 Platina	196,97 79 Au 2 Arany	200,59 80 Hg 2 Higany	204,37 81 Tl 2 Tallium	207,2 82 Pb 2 Ólom	208,98 83 Bi 2 Bizmut	209 84 Po 2 Polónium	210 85 At 2 Asztácium	222 86 Rn 2 Radon												
Q	7 223 87 Fr 2 Francium	226,03 88 Ra 2 Rádium	89-103	261 104 Rf 2 Raterfordium	262 105 Ha 2 Hanium	263 106 U_{nh} 2 Unnilhexium	262 107 U_{ns} 2 Unnilseptium	265 108 U_{no} 2 Unniloctium	266 109 U_{ne} 2 Unnilennium	*Az elemek ideiglenes elnevezése -104 Rf–Rutherfordium – 104 Ku–Kurtschatovium -105 Ha–Hanium – 105 Ns–Nielsbohrium																				

f-elemek

LANTANOIDÁK	138,91 57 La Lantán	140,12 58 Ce Cérium	140,91 59 Pr Praezodimium	144,24 60 Nd Neodimium	145 61 Pm Promethium	150,4 62 Sm Szamárrium	151,96 63 Eu Europium	157,25 64 Gd Gadolínium	158,93 65 Tb Terbium	162,50 66 Dy Diszprózium	164,93 67 Ho Holmium	167,26 68 Er Erbium	168,93 69 Tm Tulium	173,04 70 Yb Itterbium	174,97 71 Lu Lutécium
AKTINOIDÁK	227,03 89 Ac Aktínium	232,04 90 Th Tórium	231,04 91 Pa Protaktínium	238,03 92 U Urán	237,05 93 Np Neptúnium	244 94 Pu Plutónium	243 95 Am Americium	247 96 Cm Kürrium	247 97 Bk Berkélium	251 98 Cf Kalifornium	254 99 Es Einsteinium	257 100 Fm Fermium	258 101 Md Mendeléviium	259 102 No Nobélium	260 103 Lr Laurencium

27. ábra. A kémiai elemek periódusos rendszere



28. ábra. Dmitrij Ivanovics Mengyelejev (1834-1907)

2.1.6. A korrespondencia-elv.

Határesetben a kvantummechanikai törvények a megfelelő klasszikus mechanikai törvényekbe mennek át.

Pl. $|n - n'| \ll n$ esetén

$$\nu_{n,n'} = Rc \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \approx Rc \frac{2}{n^3} (n - n')$$

másrészt a keringés klasszikus frekvenciája

$$\nu_n^{kl} = Rc \frac{2}{n^3}$$

A korrespondencia-elv segítségével meghatározható az emissziós spektrumvonalak intenzitása és polarizációja. Tiltott átmenetek, kiválasztási szabályok (pl. $\delta l = \pm 1$).

2.1.7. A Bohr-elmélet korlátai

- A héliumatomra hibás eredményt ad (kaotikus dinamika, nem integrálható rendszer).
- A spektrumvonalak finomszerkezete már a hidrogénatom esetén is pontatlan.
- A spektrális intenzitás kiszámítása csak a korrespondenciaelv segítségével lehetséges.
- Az impulzusmomentum kvantálása hibás (valójában $\sqrt{l(l+1)}\hbar$ az impulzusmomentum nagysága).
- A kovalens kötést nem tudja értelmezni.

- Nem veszi figyelembe az elektronok közötti kölcsönhatást, ezért a periódusos rendszer egyes részletei (alhájak töltődésének sorrendje) a Bohr-elmélet alapján nem értelmezhetők.

3. hét

3.1. Fizikai mennyiségek mint operátorok és mérhető értékeik mint sajátértékek



29. ábra. Werner Heisenberg (1901-1976), Erwin Schrödinger (1887-1961) és Paul Adrien Maurice Dirac (1902-1984)

3.1.1. Operátorok és sajátértékeik

Az atomi jelenségekre jellemzőek a diszkrét (nem folytonos) energiaszintek ill. a diszkrét impulzusmomentumvetületek. A fizikai mennyiségeknek a kvantummechanikában hermitikus lineáris operátorok felelnek meg, melyek skalárszorozattal ellátott komplex vektortéren (Hilbert-tér) vannak értelmezve. Az operátorok sajátértékei szolgáltatják a fizikai mennyiség méréssel kapható értékeit.

Példa: a spinkomponensek operátorai véges mátrixként adhatók meg, melyek a kétdimenziós komplex vektortéren hatnak.

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Az impulzusmomentum négyzete:

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$$

Sajátértékek meghatározása:

$$\hat{S}_x \mathbf{v} = s_x \mathbf{v}$$

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = s_x \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -s_x & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & -s_x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0$$

Homogén lineáris egyenletrendszer megoldhatóságának feltétele a determináns eltűnése:

$$\det \begin{pmatrix} -s_x & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & -s_x \end{pmatrix} = s_x^2 - \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 = 0$$

tehát a sajátértékek

$$s_x = \pm \frac{\hbar}{2}$$

Hasonlóan a másik két komponens esetén:

$$\det \begin{pmatrix} -s_y & -i\frac{\hbar}{2} \\ i\frac{\hbar}{2} & -s_y \end{pmatrix} = s_y^2 - \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 = 0$$

$$s_y = \pm \frac{\hbar}{2}$$

$$\det \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} - s_z & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} - s_z \end{pmatrix} = s_z^2 - \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 = 0$$

$$s_z = \pm \frac{\hbar}{2}$$

Végül

$$\hat{S}^2$$

sajátértékei:

$$\hat{S}^2 \mathbf{v} = s^2 \mathbf{v}$$

$$\det \begin{pmatrix} \frac{3\hbar^2}{4} - s^2 & 0 \\ 0 & -\frac{3\hbar^2}{4} - s^2 \end{pmatrix} = \left(s^2 - \frac{3\hbar^2}{4}\right)^2 = 0$$

$$s^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$$

Komplex vektorokra és mátrixokra vonatkozó alapvető definíciók és tételek:

Vektor (Matematikai értelemben)

N dimenziós komplex vektor:

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ \vdots \\ V_N \end{pmatrix}, \quad V_j \in \mathbb{C}$$

Összeadás

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B})_j = A_j + B_j$$

Számmal való szorzás

$$(c\mathbf{V})_j = c V_j$$

Vektortér

ha $\mathbf{V}_1 \in \mathcal{V}$ és $\mathbf{V}_2 \in \mathcal{V}$ akkor $c_1\mathbf{V}_1 + c_2\mathbf{V}_2 \in \mathcal{V}$ ahol $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$

Lineáris függetlenség \mathbf{V}_1 és \mathbf{V}_2 lineárisan függetlenek (akkor és csak akkor), ha

$$c_1\mathbf{V}_1 + c_2\mathbf{V}_2 = 0 \implies c_1 = c_2 = 0$$

Transzponált

$$\mathbf{V}^T = (V_1 \quad V_2 \quad \dots \quad V_N)$$

Adjungált (Riesz-tétel)

$$\mathbf{V}^\dagger = (V_1^* \quad V_2^* \quad \dots \quad V_N^*)$$

Itt * a komplex konjugáltat jelenti.

Skalárszorzat (Komplex euklideszi tér)

$$(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = \mathbf{A}^\dagger \mathbf{B} = \sum_{j=1}^N A_j^* B_j$$

Emiatt

$$(\mathbf{B}, \mathbf{A}) = (\mathbf{A}\mathbf{B})^*$$

Hilbert-tér: teljes euklideszi tér. Teljesség: Cauchy-sorozatok konvergensek és a határértékük is eleme a térnek.

Ortonormált bázis, szeparábilis Hilbert-tér

$$\mathbf{e}_j \in \mathbf{H}, \quad (\mathbf{e}_j, \mathbf{e}_k) = \delta_{jk}$$

úgy, hogy

$$\forall \mathbf{V} \in \mathbf{H} \text{ esetén } \exists c_j \in \mathbb{C} \text{ úgy, hogy } \sum_j c_j \mathbf{e}_j = \mathbf{V}$$

Ekkor

$$c_j = (\mathbf{e}_j, \mathbf{V})$$

Mátrix

$$\mathbf{a} = [a_{ij}] = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \dots & a_{NN} \end{pmatrix}$$

$$(\mathbf{a}\mathbf{V})_i = \sum_{j=1}^N a_{ij} V_j$$

Egységmátrix

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

Összeg

$$(\mathbf{a} + \mathbf{b})_{ij} = a_{ij} + b_{ij}$$

Szorzat

$$(\mathbf{a}\mathbf{b})_{ij} = \sum_{k=1}^N a_{ik} b_{kj}$$

Általában $\mathbf{a}\mathbf{b} \neq \mathbf{b}\mathbf{a}$

Kommutátor

$$[\mathbf{a}, \mathbf{b}] = \mathbf{a}\mathbf{b} - \mathbf{b}\mathbf{a}$$

Inverz

$$\mathbf{a}^{-1}\mathbf{a} = \mathbf{a}\mathbf{a}^{-1} = \mathbf{1}$$

Determináns

$$\det \mathbf{a} = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} (-1)^P a_{1i_1} a_{2i_2} \dots a_{Ni_N}$$

$$\det(\mathbf{ab}) = (\det \mathbf{a})(\det \mathbf{b})$$

Homogén lineáris egyenletrendszer megoldhatósági feltétele:

$$\mathbf{aV} = 0 \quad \text{megoldása akkor és csak akkor } \exists, \text{ ha } \det \mathbf{a} = 0$$

Tranzponált

$$a_{ij}^T = a_{ji}$$

Adjungált

$$a_{ij}^\dagger = a_{ji}^*$$

$$(\mathbf{ab})^\dagger = \mathbf{b}^\dagger \mathbf{a}^\dagger$$

Önadjungált (hermitikus) mátrix (Fizikai mennyiség)

$$\mathbf{h} = \mathbf{h}^\dagger$$

Unitér mátrix (Szimmetriatranszformáció)

$$\mathbf{u}^{-1} = \mathbf{u}^\dagger$$

Unitér mátrixszal végzett transzformáció megőrzi a skalárszorzatot.

$$(\mathbf{uA}, \mathbf{uB}) = (\mathbf{uA})^\dagger \mathbf{uB} = \mathbf{A}^\dagger \mathbf{u}^\dagger \mathbf{uB} = \mathbf{A}^\dagger \mathbf{B}$$

Hasonlósági transzformáció

$$\mathbf{a}' = \mathbf{sas}^{-1}$$

Sajátérték-egyenlet

$$\mathbf{aV} = a\mathbf{V}$$

Itt a a sajátérték, \mathbf{V} a sajátvektor. Karakterisztikus egyenlet:

$$\det(\mathbf{a} - a\mathbf{1}) = 0$$

Hermitikus mátrix sajátértékei valósak, különböző sajátértékekhez tartozó sajátvektorai ortogonálisak

$$\mathbf{h}\mathbf{V} = h\mathbf{V}$$

$$\mathbf{V}^\dagger \mathbf{h}\mathbf{V} = h\mathbf{V}^\dagger \mathbf{V}$$

Adjungálva:

$$\mathbf{V}^\dagger \mathbf{h}^\dagger \mathbf{V} = h^* \mathbf{V}^\dagger \mathbf{V}$$

Tehát $h = h^*$.

$$\mathbf{h}\mathbf{V}_1 = h_1 \mathbf{V}_1$$

$$\mathbf{V}_2^\dagger \mathbf{h} = h_2 \mathbf{V}_2^\dagger$$

$$\mathbf{V}_2^\dagger \mathbf{h}\mathbf{V}_1 = h_1 \mathbf{V}_2^\dagger \mathbf{V}_1$$

$$\mathbf{V}_2^\dagger \mathbf{h}\mathbf{V}_1 = h_2 \mathbf{V}_2^\dagger \mathbf{V}_1$$

Mivel $h_1 \neq h_2$, $\mathbf{V}_2^\dagger \mathbf{V}_1 = 0$.

A sajátvektorok teljes bázist alkotnak.

A sajátvektorai bázisán a hermitikus mátrix diagonális.

A normált sajátvektorokból unitér mátrix képezhető. Az ezzel elvégzett hasonlósági transzformáció a hermitikus mátrixot diagonális alakra hozza.

Felcserélhető hermitikus mátrixoknak van közös sajátvektor-rendszere. Legyenek \mathbf{a} és \mathbf{b} felcserélhető hermitikus mátrixok. Ekkor

$$\mathbf{a}\mathbf{V} = a\mathbf{V}$$

$$\mathbf{b}\mathbf{a}\mathbf{V} = \mathbf{a}(\mathbf{b}\mathbf{V}) = a(\mathbf{b}\mathbf{V})$$

Ha a egyszeres sajátérték,

$$\mathbf{b}\mathbf{V} = b\mathbf{V}$$

(Ha a többszörös sajátérték, akkor \mathbf{b} a megfelelő alteret önmagára képezi le, emiatt \mathbf{V} megválasztható úgy, hogy \mathbf{b} sajátvektora legyen)

Elfajult sajátértékek. Ha \mathbf{a} és \mathbf{b} nem felcserélhető hermitikus mátrixok, de mindkettő felcserélhető a \mathbf{c} hermitikus mátrixszal, akkor \mathbf{c} -nek van elfajult sajátértéke (több sajátvektor tartozik egy sajátértékhez). Ui.

$$\mathbf{c}\mathbf{V} = c\mathbf{V}$$

$$\mathbf{c}(\mathbf{aV}) = c(\mathbf{aV})$$

$$\mathbf{c}(\mathbf{bV}) = c(\mathbf{bV})$$

De minden sajátvektorra $\mathbf{aV} = \text{const.} \times \mathbf{bV}$ nem teljesülhet, mert akkor \mathbf{a} és \mathbf{b} felcserélhető volna.

3.1.2. A Heisenberg-féle felcserélési törvények

Poisson-zárójelek a klasszikus mechanikában:

$$\{f(q, p), g(q, p)\} = \sum_j \frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial g}{\partial p_j} - \frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial g}{\partial q_j}$$

Ha $f = q_k$ és $g = p_l$, akkor

$$\{q_k, p_l\} = \delta_{kl}$$

A Heisenberg-féle felcserélési törvények

$$[\hat{q}_k, \hat{p}_l] = i\hbar\delta_{kl}\hat{1}$$

Operátorok koordinátareprezentációban. Hilbert-tér: négyzetesen integrálható függvények.

A koordináta operátora:

$$\hat{x} = x$$

Az impulzus operátora:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Vektoriálisan:

$$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$$

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$$

skalárszorzat:

$$(f, g) = \int f^*(\mathbf{r})g(\mathbf{r})dV$$

Hidrogénatom alapállapota.

Az energia operátora:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} \hat{p}^2 - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Polárkoordinátákban:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \right] - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Keressünk $\exp(-a r)$ alakú sajátfüggvényt!

$$\hat{H} \exp(-a r) = -\frac{\hbar^2}{2m_e} a^2 \exp(-a r) + \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{2a}{r} \exp(-a r) - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \exp(-a r)$$

Ez akkor lesz a próbafüggvény számszorosa, ha

$$a = \frac{q_e^2 m_e}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}$$

Ekkor

$$H \exp(-a r) = -\frac{\hbar^2 a^2}{2m_e} \exp(-a r)$$

Tehát a sajátérték

$$E_0 = -\frac{q_e^4 m_e}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}$$

Operátorok mátrix reprezentációja.

Impulzusreprezentáció.

Korlátos és nem korlátos operátorok.

Dirac-féle absztrakt jelölésmód. Bra és ket vektorok

$$\langle \phi |, \quad |\psi \rangle$$

skalárszorzat:

$$\langle \phi | \psi \rangle$$

operátor mátrixeleme:

$$\langle \phi | \mathbf{O} | \psi \rangle$$

3.1.3. A lineáris harmonikus oszcillátor

Klasszikus formulák:

Kitéréssel arányos visszatérítő erő (kis rezgés):

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -Dx$$

A mozgásegyenlet megoldása:

$$x = x_0 \cos(\omega t + \delta), \quad \omega = \sqrt{\frac{D}{m}}$$

Energia (Hamilton-függvény)

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2$$

Kvantummechanikai tárgyalásmód:

Energiaoperátor koordinátareprezentációban:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2$$

Sajátérték-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \psi = E \psi$$

Új, dimenziótlan változók:

$$k = \frac{2E}{\hbar\omega}, \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

Sajátérték-egyenlet dimenziótlanított alakban:

$$\frac{d^2 \psi}{d\xi^2} + (k - \xi^2) \psi = 0$$

Megoldás Sommerfeld-féle polinom-módszerrel:

Aszimptotikus megoldás (nagy ξ -re):

$$\frac{d^2 \psi}{d\xi^2} \approx \xi^2 \psi$$

$$\psi = \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

A pontos megoldást $\psi = (\text{polinom}) \times \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$ alakban keressük:

$$\psi = \left(\sum_{j=0}^n c_j \xi^j\right) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

$$\frac{d\psi}{d\xi} = \left(\sum_{j=0}^n c_j \xi^j\right) (-\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) + \left(\sum_{j=0}^n j c_j \xi^{j-1}\right) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi}{d\xi^2} &= \left(\sum_{j=0}^n c_j \xi^j\right) \xi^2 \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) + 2 \left(\sum_{j=0}^n j c_j \xi^{j-1}\right) (-\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) - \left(\sum_{j=0}^n c_j \xi^j\right) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \\ &+ \left(\sum_{j=0}^n j(j-1) c_j \xi^{j-2}\right) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \end{aligned}$$

$$\left(\sum_{j=0}^n j c_j \xi^{j-1}\right) \xi = \sum_{j=0}^n j c_j \xi^j$$

$$\sum_{j=0}^n j(j-1) c_j \xi^{j-2} = \sum_{j=0}^{n-2} (j+2)(j+1) c_{j+2} \xi^j$$

Tehát a sajátértékegyenletből

$$\sum_{j=0}^{n-2} (j+2)(j+1) c_{j+2} \xi^j + \sum_{j=0}^n (k - (2j+1)) c_j \xi^j = 0$$

Ebből $j = n$ esetén

$$k = 2n + 1$$

azaz

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

$$\psi_n = e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)$$

$H_n(\xi)$: Hermite-polinom

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n}{d\xi} + 2n H_n = 0$$

3.1.4. Az impulzusmomentum

A klasszikus mechanikában az impulzusmomentum megmaradása a forgási invariancia következménye. A kvantummechanikában az impulzusmomentum operátora a végtelen kis elforgatás operátorával arányos.

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla$$

(bizonyítandó, hogy hermitikus)

Valóban, $\delta\phi$ szögű elforgatás során a helyvektor változása $\delta\mathbf{r} = \delta\phi \times \mathbf{r}$, így egy $\psi(\mathbf{r})$ függvény megváltozása

$$\delta\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}) - \psi(\mathbf{r}) \approx (\delta\mathbf{r} \nabla) \psi = (\delta\phi \times \mathbf{r}) \nabla \psi = \delta\phi (\mathbf{r} \times \nabla) \psi$$

forgási invariancia \iff az impulzusmomentum operátora felcserélhető az energia operátorával

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\hat{H}\hat{\mathbf{L}}\psi = E\hat{\mathbf{L}}\psi$$

$$\hat{\mathbf{L}}\hat{H}\psi = E\hat{\mathbf{L}}\psi$$

Az impulzusmomentum-komponensek felcserélési szabályai:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_j, \hat{L}_k] &= \epsilon_{jmn} \hat{r}_m \hat{p}_n \epsilon_{kst} \hat{r}_s \hat{p}_t - \epsilon_{kst} \hat{r}_s \hat{p}_t \epsilon_{jmn} \hat{r}_m \hat{p}_n = \epsilon_{jmn} \epsilon_{kst} (\hat{r}_m \hat{p}_n \hat{r}_s \hat{p}_t - \hat{r}_s \hat{p}_t \hat{r}_m \hat{p}_n) \\ &= \epsilon_{jmn} \epsilon_{kst} (\hat{r}_m (-i\hbar \delta_{ns} + \hat{r}_s \hat{p}_n) \hat{p}_t - \hat{r}_s (-i\hbar \delta_{mt} + \hat{r}_m \hat{p}_t) \hat{p}_n) \\ &= -i\hbar \hat{r}_m \hat{p}_t (\epsilon_{jms} \epsilon_{kst} - \epsilon_{jst} \epsilon_{kms}) \end{aligned}$$

Mivel pedig

$$\epsilon_{jms} \epsilon_{kst} = \epsilon_{jms} \epsilon_{tks} = \delta_{jt} \delta_{mk} - \delta_{jk} \delta_{mt}$$

ill.

$$\epsilon_{jst} \epsilon_{kms} = \epsilon_{tjs} \epsilon_{kms} = \delta_{tk} \delta_{jm} - \delta_{tm} \delta_{jk}$$

végül

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = -i\hbar \hat{r}_m \hat{p}_t (\delta_{jt} \delta_{mk} - \delta_{tk} \delta_{jm}) = -i\hbar \epsilon_{jks} \epsilon_{stm} \hat{r}_m \hat{p}_t = i\hbar \epsilon_{jks} \hat{L}_s$$

Pályamomentum és spinmomentum

$$[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar \epsilon_{jkt} \hat{S}_t$$

Továbbá

$$[\hat{L}_j, \hat{L}^2] = 0, \quad [\hat{S}_j, \hat{S}^2] = 0$$

ii.

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_j, \hat{L}^2] &= [\hat{L}_j, \hat{L}_k^2] = \hat{L}_j \hat{L}_k \hat{L}_k - \hat{L}_k \hat{L}_k \hat{L}_j \\
&= \left(i\hbar \epsilon_{jkn} \hat{L}_n + \hat{L}_k \hat{L}_j \right) \hat{L}_k - \hat{L}_k \left(i\hbar \epsilon_{kjn} \hat{L}_n + \hat{L}_j \hat{L}_k \right) \\
&= i\hbar \left(\epsilon_{jkn} \hat{L}_n \hat{L}_k - \epsilon_{kjn} \hat{L}_k \hat{L}_n \right) = i\hbar \epsilon_{jkn} \left(\hat{L}_n \hat{L}_k + \hat{L}_k \hat{L}_n \right) = 0
\end{aligned}$$

mivel ϵ_{jkn} a k, n összegző indexekben antiszimmetrikus, míg $\hat{L}_n \hat{L}_k + \hat{L}_k \hat{L}_n$ ugyanezekben az indexekben szimmetrikus (a teljes kifejezés emiatt egyenlő önmaga -1 -szeresével, tehát nulla).

Az impulzusmomentum sajátértékei és sajátfüggvényei

A felcserélési szabályok alapján közös sajátfüggvény-rendszere van pl. \hat{L}_z -nek és \hat{L}^2 -nek. Impulzusmomentum-komponensek kifejezése derékszögű koordinátákban:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\
\hat{L}_y &= -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\
\hat{L}_z &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \\
\hat{L}^2 &= -\hbar^2 \left(r^2 \Delta - (\mathbf{r} \nabla)^2 - \mathbf{r} \nabla \right)
\end{aligned}$$

Impulzusmomentum-komponensek kifejezése gömbi polárkoordinátákban:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= -i\hbar \left(-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cos \varphi \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\
\hat{L}_y &= -i\hbar \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \sin \varphi \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\
\hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \\
\hat{L}^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)
\end{aligned}$$

Az impulzusmomentum bármely komponense és az impulzusmomentum négyzete felcserélhetők, ezért létezik közös sajátfüggvény-rendszerük. A különböző komponensek nem cserélhetők fel (\Rightarrow elfajulás), ezért pl. \hat{L}_z és \hat{L}^2 közös sajátfüggvényeit kereshetjük meg.

$$\hat{L}_z \psi = l_z \psi$$

$$\hat{L}^2 \psi = L^2 \psi$$

Itt l_z és L^2 a sajátértékek (valós számok), míg ψ a közös sajátfüggvény. Beírva a polárkoordinátás alakot \hat{L}_z sajátérték-egyenletébe:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = l_z \psi$$

Ennek megoldása (az integrációs állandó csak φ vonatkozásában állandó, ϑ -tól függhet):

$$\psi = \Theta(\vartheta) \exp\left(i \frac{l_z}{\hbar} \varphi\right)$$

mivel pedig ψ -nek 2π szerint periodikusnak kell lennie φ -ben (hiszen φ és $\varphi + 2\pi$ ugyanaz a térbeli pont, ha r és ϑ változatlan),

$$l_z = m\hbar$$

(m egész szám) és

$$\psi = \Theta(\vartheta) e^{im\varphi}$$

Ezt behelyettesítjük \hat{L}^2 sajátérték-egyenletébe. Kapjuk:

$$-\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \right) \Theta(\vartheta) e^{im\varphi} = L^2 \Theta(\vartheta) e^{im\varphi}$$

egyszerűsítve:

$$\left(\frac{d^2}{d\vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{d}{d\vartheta} - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} + \frac{L^2}{\hbar^2} \right) \Theta(\vartheta) = 0$$

(Mivel Θ csak ϑ függvénye, közöséges differenciálegyenletet kell megoldanunk.) Felhasználjuk a

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \sin \vartheta \frac{d}{d\vartheta} = \frac{d^2}{d\vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{d}{d\vartheta}$$

azonosságot:

$$\left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \sin \vartheta \frac{d}{d\vartheta} - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} + \frac{L^2}{\hbar^2} \right) \Theta(\vartheta) = 0$$

és bevezetjük a

$$\xi = \cos \vartheta$$

új változót. Mivel $d\xi = -\sin\vartheta d\vartheta$,

$$\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{d}{d\vartheta} = -\frac{d}{d\xi}$$

és

$$\sin\vartheta \frac{d}{d\vartheta} = -\sin^2\vartheta \frac{d}{d\xi} = -(1-\xi^2) \frac{d}{d\xi}$$

Ezzel a sajátérték-egyenlet:

$$\frac{d}{d\xi} \left((1-\xi^2) \frac{d\Theta}{d\xi} \right) + \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-\xi^2} \right) \Theta = 0$$

Ennek az egyenletnek $\xi = \pm 1$ szinguláris pontjai. Ezek közelében a megoldás $(1-\xi^2)$ valamilyen hatványával kell hogy eltűnjön, hogy a szinguláris $\frac{m^2}{1-\xi^2}$ tényezőt kompenzálja. Keressük tehát az aszimptotikus (azaz $|\xi| \approx 1$ esetén közelítőleg érvényes) megoldást $\Theta = (1-\xi^2)^a$ alakban.

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} \left((1-\xi^2) \frac{d\Theta}{d\xi} \right) &= \frac{d}{d\xi} \left((1-\xi^2)(-2a\xi)(1-\xi^2)^{a-1} \right) = \frac{d}{d\xi} \left((-2a\xi)(1-\xi^2)^a \right) \\ &= -2a(1-\xi^2)^a + 4a^2\xi^2(1-\xi^2)^{a-1} = -(2a+4a^2)(1-\xi^2)^a + 4a^2(1-\xi^2)^{a-1} \end{aligned}$$

$|\xi| \approx 1$ esetén a második tag dominál. Ennek kell a $-\frac{m^2}{1-\xi^2}\Theta = -m^2(1-\xi^2)^{a-1}$ tagot kompenzálnia, tehát

$$4a^2 = m^2$$

Így tehát az aszimptotikus megoldás

$$\Theta_a = (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}}$$

A Sommerfeld-féle polinom-módszerrel keressük a pontos sajátfüggvényt:

$$\Theta = (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \sum_{j=0}^k c_j \xi^j$$

$$(1-\xi^2) \frac{d\Theta}{d\xi} = -|m|\xi(1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \sum_{j=0}^k c_j \xi^j + (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}+1} \sum_{j=0}^k j c_j \xi^{j-1}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} \left((1-\xi^2) \frac{d\Theta}{d\xi} \right) &= -|m|(1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \sum_{j=0}^k c_j \xi^j + m^2 \xi^2 (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}-1} \sum_{j=0}^k c_j \xi^j - |m|\xi(1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \sum_{j=0}^k j c_j \xi^{j-1} \\ &\quad - (|m|+2)\xi(1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \sum_{j=0}^k j c_j \xi^{j-1} + (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}+1} \sum_{j=0}^k j(j-1) c_j \xi^{j-2} \end{aligned}$$

$$\frac{d}{d\xi} \left((1 - \xi^2) \frac{d\Theta}{d\xi} \right) + \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right) \Theta = (1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \left[\sum_{j=0}^k \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - (|m| + j)(|m| + j + 1) \right) c_j \xi^j + \sum_{j=0}^{k-2} (j + 2)(j + 1) c_{j+2} \xi^j \right]$$

Ennek a kifejezésnek az eltűnéséből $j = k$ esetén

$$\frac{L^2}{\hbar^2} = (|m| + k)(|m| + k + 1)$$

következik, vagy ($l = |m| + k$ jelöléssel, $l \geq |m|$):

$$L^2 = l(l + 1)\hbar^2$$

Sajátfüggvények:

$$\psi_{lm} = (1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} P_l^m(\xi) e^{-im\varphi}$$

$P_l^m(\xi)$: csatolt Legendre-polinom ($l - |m|$ fokú).

A sajátfüggvény meghatározása más módszerrel:

$l = |m|$ esetén $k = 0$, tehát

$$\Theta_{l,-l}(\vartheta) = (1 - \xi^2)^{\frac{l}{2}} = \sin^l \vartheta$$

és így

$$\psi_{l,-l}(\vartheta, \varphi) = \sin^l \vartheta e^{-il\varphi}$$

A többi sajátfüggvény:

A felcserélési relációk szerint

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y$$

$$[\hat{L}_z, i\hat{L}_y] = \hbar \hat{L}_x$$

Emiatt

$$[\hat{L}_z, (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)] = \hbar(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)$$

vagy

$$\hat{L}_z(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) - (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)\hat{L}_z = \hbar(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)$$

Alkalmazva mindkét oldalt a ψ_{lm} sajátfüggvényre:

$$\hat{L}_z(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)\psi_{lm} - (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)m\hbar\psi_{lm} = \hbar(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)\psi_{lm}$$

Tehát

$$\hat{L}_z \left((\hat{L}_x + i\hat{L}_y)\psi_{lm} \right) = (m+1)\hbar \left((\hat{L}_x + i\hat{L}_y)\psi_{lm} \right)$$

Másrészt $\hat{L}_x + i\hat{L}_y$ felcserélhető \hat{L}^2 -tel, tehát

$$\hat{L}^2 \left((\hat{L}_x + i\hat{L}_y)\psi_{lm} \right) = l(l+1)\hbar^2 \left((\hat{L}_x + i\hat{L}_y)\psi_{lm} \right)$$

Ezek szerint

$$\psi_{l,m+1} \propto (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)\psi_{lm}$$

$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$: léptető operátor (emissziós operátor). Nem hermitikus!

$$\hat{L}_+ = \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

Ezzel tehát

$$\psi_{lm} = \left[e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right]^{m+l} \sin^l \vartheta e^{-il\varphi}$$

A normált sajátfüggvények az ún. gömbfüggvények:

$$Y_{lm} = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} i^l \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2} \sin^{|m|} \vartheta P_l^{|m|}(\cos \vartheta) e^{im\varphi}$$

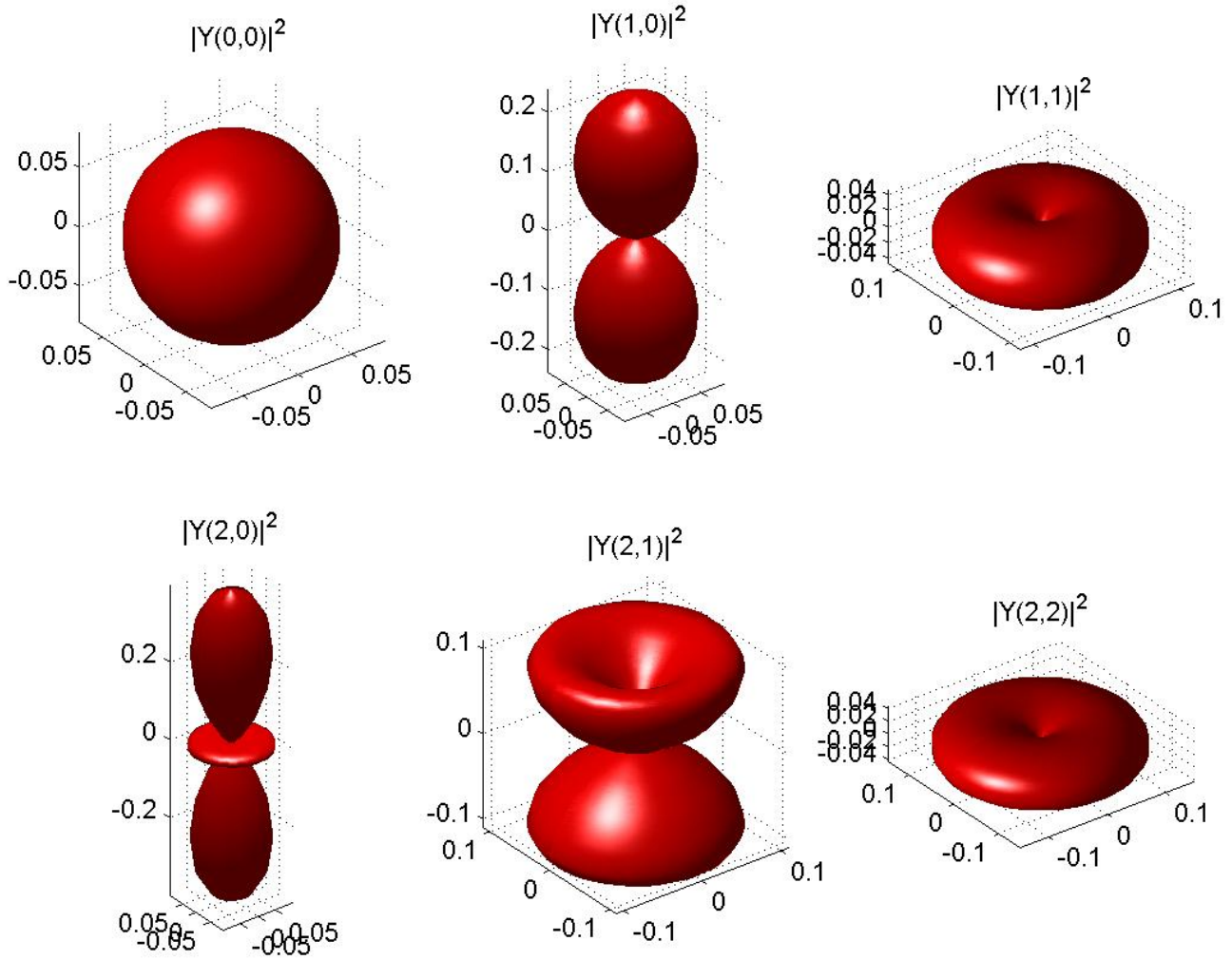
vagy expliciten:

$$Y_{lm} = (-i)^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{1}{2^l l!}} \frac{d^{l-m}}{\sin^m \vartheta (d \cos \vartheta)^{l-m}} \sin^{2l} \vartheta e^{im\varphi}$$

$$\hat{L}_z Y_{lm} = m\hbar Y_{lm}$$

$$\hat{L}^2 Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l'm'}(\vartheta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$



30. ábra. Az $l = 1$ és $l = 2$ mellékvantumszámú gömbfüggvények

3.1.5. A rotátor

Forgó molekulák színeképe (rotációs színekép). Mozgó tömegpont energiája $r = \text{állandó}$ esetén:
Klasszikusan

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

azaz

$$\mathbf{L}^2 = r^2 \mathbf{p}^2 - r^2 p_r^2$$

és így

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2}$$

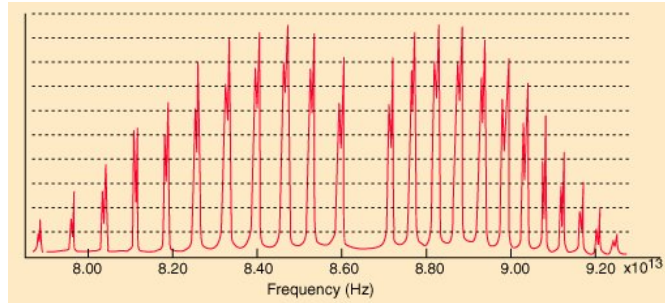
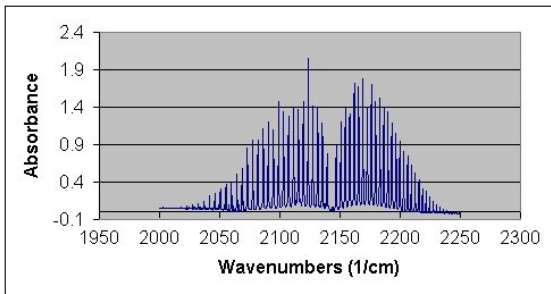
Kvantummechanikailag

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \text{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \right]$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \psi(\vartheta, \varphi) = E \psi(\vartheta, \varphi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + \text{ctg} \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right) = E \psi$$

$$\frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2\mu r^2} \psi = E \psi, \quad E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$$



31. ábra. A szénmonoxid (CO) és a sósav (HCl) molekula rezgési és forgási spektruma (infravörös abszorpciós spektrum)

3.1.6. Centrális erőterben mozgó tömegpont energia-sajátértékei és sajátfüggvényei

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(r)\right) \psi = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \right] \psi + V(r)\psi = E\psi$$

A gömbszimmetria következtében \hat{H} felcserélhető \hat{L}_z -vel és \hat{L}^2 -tel.

$$\psi = R_l(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) R(r) = 0$$

3.1.7. Merev falú gömbbe zárt tömegpont

$$V(r) = \begin{cases} 0, & \text{ha } r < a \\ +\infty, & \text{ha } r \geq a \end{cases}$$

3.1.8. Háromdimenziós potenciálvölgy

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & \text{ha } r < a \\ 0, & \text{ha } r \geq a \end{cases}$$

3.1.9. A hidrogénatom

$$V(r) = -\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Kötött állapotok: $E < 0$

Atomi hosszegység:

$$r_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu|E|}}$$

Dimenziótlan változó és paraméter:

$$\xi = 2\frac{r}{r_0}, \quad \mathcal{E} = \frac{\mu q_e^2 r_0}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}$$

A dimenziótlanított sajátérték-egyenlet (időfüggetlen Schrödinger-egyenlet):

$$\frac{d^2 R}{d\xi^2} + \frac{2}{\xi} \frac{dR}{d\xi} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\mathcal{E}}{\xi} - \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right] R = 0$$

Közelítő megoldás nagy ξ -re:

$$R = e^{-\frac{\xi}{2}}$$

Közelítő megoldás kis ξ -re:

$$R = \xi^l$$

Pontos megoldás:

$$R = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^l \sum_{j=0}^p c_j \xi^j$$

Behelyettesítve:

$$\sum_{j=0}^p (\mathcal{E} - l - j - 1) c_j \xi^j + \sum_{j=0}^{p-1} (j+1)(2(l+1) + j) c_{j+1} \xi^j = 0$$

$$\mathcal{E} = l + p + 1$$

$n = l + p + 1$ jelöléssel ($p \geq 0$ miatt $n \geq l + 1$)

$$E = -\frac{\mu q_e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

Általánosított Laguerre-polinomok.

4. hét

4.1. Fizikai állapot és dinamikája. A Schrödinger-egyenlet

4.1.1. A dinamikai egyenlet

$$(-\hat{H})\hat{t} - \hat{t}(-\hat{H}) = -i\hbar\hat{1}$$

$$\hat{t} = t, \quad \hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(x, y, z)$$

Időtől függő Schrödinger-egyenlet:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

4.1.2. Az állapotfüggvény fizikai jelentése

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\psi + V(x, y, z)\psi$$

$$i\hbar\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi^*\Delta\psi + V(x, y, z)\psi^*\psi$$

$$-i\hbar\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi\Delta\psi^* + V(x, y, z)\psi^*\psi$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi^*\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*)$$

$$\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^* = \psi^*\nabla\nabla\psi - \psi\nabla\nabla\psi^* = \nabla(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$$

Kontinuitási egyenlet:

$$\frac{\partial\psi^*\psi}{\partial t} + \nabla\left(\frac{i\hbar}{2\mu}[\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi]\right) = 0$$

$$\rho = \psi^*\psi$$

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2\mu}[\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi]$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\mathbf{j} = 0$$

$$\begin{aligned}
-\frac{d}{dt} \int_V \rho dV &= \oint_F \mathbf{j} d\mathbf{f} \\
\hat{O}|\psi_k\rangle &= o_k |\psi_k\rangle \\
\langle \psi_j | \psi_k \rangle &= \delta_{jk} \\
|\psi\rangle &= \sum_k c_k |\psi_k\rangle
\end{aligned}$$

Valószínűség:

$$w_k = |c_k|^2 = |\langle \psi_k | \psi \rangle|^2$$

Várható érték:

$$\begin{aligned}
\bar{O} &= \sum_k w_k o_k = \sum_k \langle \psi | \psi_k \rangle o_k \langle \psi_k | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle \\
\sum_k |\psi_k\rangle o_k \langle \psi_k | \psi_j \rangle &= \sum_k |\psi_k\rangle o_k \delta_{jk} = o_j |\psi_j\rangle
\end{aligned}$$

4.1.3. Stacionárius állapotok

$$\begin{aligned}
\hat{H}|\psi_j\rangle &= E_j |\psi_j\rangle \\
|\psi(t)\rangle &= \sum_j c_j(t) |\psi_j\rangle \\
i\hbar \sum_j \dot{c}_j |\psi_j\rangle &= \hat{H} \sum_j c_j |\psi_j\rangle = \sum_j c_j E_j |\psi_j\rangle \\
i\hbar \dot{c}_j &= E_j c_j \\
c_j &= c_j(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} \\
|\psi(t)\rangle &= \sum_j c_j(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} |\psi_j\rangle
\end{aligned}$$

Stacionárius állapot:

$$e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} |\psi_j\rangle$$

Stacionárius állapotban a valószínűsége sűrűség állandó:

$$|\psi|^2 = |\psi_j|^2$$

4.1.4. A Heisenberg-féle határozatlansági összefüggések

Nem felcserélhető operátoroknak nincs közös sajátfüggvény-rendszere. (pl. koordináta és impulzus, impulzusmomentum x és y komponense)

Szórásnégyzet:

$$(\Delta O)^2 = \sum_k w_k (o_k - \bar{O})^2 = \sum_k \langle \psi | \psi_k \rangle (o_k - \bar{O})^2 \langle \psi_k | \psi \rangle = \langle \psi | (\hat{O} - \bar{O})^2 | \psi \rangle$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$$

$$\hat{A}' = \hat{A} - \bar{A}$$

$$\hat{B}' = \hat{B} - \bar{B}$$

$$[\hat{A}', \hat{B}'] = i\hat{C}$$

$$(\Delta A)^2 = \langle \psi | \hat{A}'^2 | \psi \rangle = \langle \psi_a | \psi_a \rangle$$

$$|\psi_a \rangle = \hat{A}' | \psi \rangle$$

$$(\Delta B)^2 = \langle \psi | \hat{B}'^2 | \psi \rangle = \langle \psi_b | \psi_b \rangle$$

$$|\psi_b \rangle = \hat{B}' | \psi \rangle$$

Cauchy-Schwartz-Bunyakovszkij-féle egyenlőtlenség:

$$\langle \psi_a | \psi_a \rangle \langle \psi_b | \psi_b \rangle \geq |\langle \psi_a | \psi_b \rangle|^2$$

$$|\langle \psi_a | \psi_b \rangle|^2 = \langle \psi_a | \psi_b \rangle \langle \psi_b | \psi_a \rangle = \langle \psi | \hat{A}' \hat{B}' | \psi \rangle \langle \psi | \hat{B}' \hat{A}' | \psi \rangle$$

$$\hat{A}' \hat{B}' = \frac{1}{2} \left((\hat{A}' \hat{B}' + \hat{B}' \hat{A}') + (\hat{A}' \hat{B}' - \hat{B}' \hat{A}') \right)$$

$$\hat{B}' \hat{A}' = \frac{1}{2} \left((\hat{A}' \hat{B}' + \hat{B}' \hat{A}') - (\hat{A}' \hat{B}' - \hat{B}' \hat{A}') \right)$$

$$\langle \psi | \hat{A}' \hat{B}' | \psi \rangle \langle \psi | \hat{B}' \hat{A}' | \psi \rangle = \frac{1}{4} \left\{ \left(\langle \psi | \hat{A}' \hat{B}' + \hat{B}' \hat{A}' | \psi \rangle \right)^2 - \left(\langle \psi | \hat{A}' \hat{B}' - \hat{B}' \hat{A}' | \psi \rangle \right)^2 \right\} \geq \frac{1}{4} \left(\langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle \right)^2$$

Végül tehát

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} \bar{C}$$

Mivel

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \hat{1}$$

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Heisenberg gondolkísérlete: a mikroszkóp felbontása a használt fény hullámhosszának nagyságrendjébe esik, pontosabban ϵ nyílásszögű fénynyaláb esetén

$$\Delta x = \frac{\lambda}{2 \sin \frac{\epsilon}{2}}$$

Ekkor azonban a mért részecskén szóródó foton

$$\approx 2 \frac{h}{\lambda} \sin \frac{\epsilon}{2}$$

nagyságú impulzust ad át a részecskének, ekkora lesz tehát Δp_x . Ezzel

$$\Delta x \Delta p_x \approx h$$

Az energia-idő határozatlansági reláció.

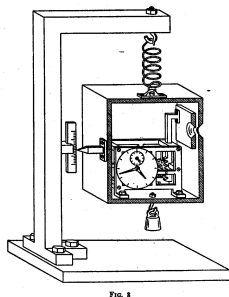
$$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

Bohr-Einstein-vita.



32. ábra. Albert Einstein és Niels Bohr a brüsszeli Solvay konferencián

Gondolatkísérlet a dobozba zárt sugárzással.



33. ábra. Az energia és idő közötti határozatlansági reláció „megkerülésére” Einstein által javasolt szerkezet (Bohr rajza)

A mutató helyzetének Δx pontosságú meghatározása

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x}$$

mértékű pontatlanságot okoz a doboz impulzusában. Ha a mérlegelés időtartama T , akkor a dobozra ható erőben ez

$$\Delta F = \frac{\Delta p}{T} \geq \frac{\hbar}{2T\Delta x}$$

pontatlansághoz vezet. Emiatt a tömeg mérése legfeljebb olyan Δm pontosságú lehet, melyre

$$\Delta mg = \Delta F ,$$

azaz

$$\Delta m \geq \frac{\hbar}{2gT\Delta x}$$

Az energia bizonytalansága ezzel

$$\Delta E = \Delta mc^2 \geq \frac{\hbar c^2}{2gT\Delta x}$$

Másrésztől azonban az általános relativitáselmélet szerint Δx nagyságú elmozdulás g nehézségi gyorsuláshoz tartozó gravitációs térben T idő alatt az óra olyan ΔT nagyságú sietéséhez (vagy késéséhez, az elmozdulás irányától függően) vezet, melyre

$$\Delta T = \frac{g\Delta x}{c^2} T .$$

Emiatt a hely mérésének hibája és a mérés véges időtartama az idő mérésében hibához vezet. Az előző két összefüggésből Δx -et kiküszöbölve kapjuk, hogy

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{2\Delta T},$$

összhangban az energia és idő közötti határozatlansági relációval.

4.1.5. A fizikai mennyiségek középértékének időbeli változása. Az Ehrenfest-tétel

$$\frac{d}{dt}\bar{O} = \frac{d}{dt} \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \left(\frac{d}{dt} \langle \psi | \right) \hat{O} | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{O} \left(\frac{d}{dt} | \psi \rangle \right)$$

$$\frac{d}{dt}\bar{O} = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | \hat{H} \hat{O} | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} | \psi \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi | \hat{O} \hat{H} | \psi \rangle = \langle \psi | \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} | \psi \rangle + \frac{i}{\hbar} \langle \psi | [\hat{H}, \hat{O}] | \psi \rangle$$

A koordinátára és az impulzusra alkalmazva:

$$\frac{d}{dt}\bar{\mathbf{r}} = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | [\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}] | \psi \rangle$$

$$\frac{d}{dt}\bar{\mathbf{p}} = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | [\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] | \psi \rangle$$

Ha

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(\hat{\mathbf{r}})$$

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}] = \frac{1}{2\mu} [\hat{p}^2, \hat{\mathbf{r}}] = -\frac{i\hbar}{\mu} \hat{\mathbf{p}}$$

és

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] = [V(\hat{\mathbf{r}}), \hat{\mathbf{p}}] = i\hbar \nabla V(\hat{\mathbf{r}}) \equiv -i\hbar \mathbf{F}(\hat{\mathbf{r}})$$

ezzel

$$\frac{d}{dt}\bar{\mathbf{r}} = \frac{\langle \psi | \hat{\mathbf{p}} | \psi \rangle}{\mu}$$

$$\frac{d}{dt}\bar{\mathbf{p}} = \langle \psi | \mathbf{F}(\hat{\mathbf{r}}) | \psi \rangle$$

4.1.6. Szabad tömegpont mozgásának kvantummechanikai leírása

Írjuk fel a

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \psi = 0$$

Schrödinger-egyenlet megoldását négydimenziós Fourier-integrál alakjában (az általánosságot ez nem csorbítja)!

$$\psi = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \tilde{\psi}(\omega, \mathbf{k}) e^{-i\omega t + i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

Az egyenletbe behelyettesítve

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \left(-\hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \right) \tilde{\psi}(\omega, \mathbf{k}) = 0$$

Ez csak úgy teljesülhet, ha

$$\tilde{\psi}(\omega, \mathbf{k}) \propto \delta \left(-\hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \right)$$

(az arányossági tényező \mathbf{k} függvénye lehet) ezért az általános megoldás

$$\psi = \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_{-\infty}^{\infty} dk_z f(\mathbf{k}) \exp \left(-i \frac{\hbar k^2 t}{2\mu} + i\mathbf{k}\mathbf{r} \right)$$

Ez síkhullámok szuperpozíciója.

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = \frac{p^2}{2\mu}$$

Dirac-deltára normált síkhullámok (ezek egyben stacionárius állapotok, energia- és impulzus-sajátállapotok is) koordinátareprezentációban:

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \exp \left(-i \frac{p^2 t}{2\mu\hbar} + i \frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar} \right)$$

Valóban,

$$\hat{\mathbf{p}}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = -i\hbar\nabla\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \mathbf{p}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$$

Továbbá

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ikx} = 2\pi\delta(k),$$

miatt

$$\int d^3\mathbf{r} \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) = \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$$

Itt $\delta^3(\mathbf{p}) = \delta(p_x)\delta(p_y)\delta(p_z)$.

Matematikai kitérő:

Legyen $f(x)$ valós függvény, melyre

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) = 1$$

Ekkor

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{|a|} f\left(\frac{x}{a}\right)$$

Bármely Dirac-deltára vonatkozó azonosságot ennek az összefüggésnek az alapján lehet elvégezni.

Példa:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ikx} = \lim_{a \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ikx} e^{-a^2 x^2} = \lim_{a \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-a^2(x - i\frac{k}{2a^2})^2 - \frac{k^2}{4a^2}} = \lim_{a \rightarrow 0} e^{-\frac{k^2}{4a^2}} \frac{\sqrt{\pi}}{|a|} = 2\pi\delta(k)$$

A hullámfüggvény impulzusreprezentációban:

$$\psi(\mathbf{p}, t) = \langle \psi_{\mathbf{p}} | \psi \rangle = \int d^3\mathbf{r} \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} f\left(\frac{\mathbf{p}}{\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{p^2 t}{2\mu\hbar}\right)$$

ezzel

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3\mathbf{p} \psi(\mathbf{p}, 0) \exp\left(-i\frac{p^2 t}{2\mu\hbar} + i\frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right)$$

Interferencia.

4.1.7. A kvantummechanika kapcsolata a klasszikus mechanikával

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \hat{H} \psi = 0$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(x, y, z)$$

Klasszikus határeset: az a távolság, amin a potenciál észrevehetően megváltozik, sokkal nagyobb a hullámhossznál (v.ö. geometriai optika, eikonál-egyenlet)

$$\psi = A(x, y, z, t) e^{i\frac{S(x, y, z, t)}{\hbar}}$$

Itt A és S valós függvények (amplitudó és fázis).

$$A \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{A}{2\mu} (\nabla S)^2 + \frac{\hbar}{2i\mu} A \Delta S + \frac{\hbar}{i\mu} \nabla S \nabla A - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta A + VA = 0$$

A valós és képzetes részeket szétválasztva:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2\mu} (\nabla S)^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu A} \Delta A + V = 0$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{1}{2\mu} A \Delta S + \frac{1}{\mu} \nabla S \nabla A = 0$$

$\hbar \rightarrow 0$ esetén a Hamilton-Jacobi-egyenletet kapjuk.

A hullámfüggvény szétfolyása

Szabad mozgást végző részecske:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3\mathbf{p} \psi(\mathbf{p}, 0) \exp\left(-i\frac{p^2 t}{2\mu\hbar} + i\frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right)$$

Legyen

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{3}{4}}} \exp\left(-\frac{r^2}{4\sigma^2} + i\frac{\mu\mathbf{v}\mathbf{r}}{\hbar}\right).$$

Ekkor

$$\psi(\mathbf{p}, 0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3\mathbf{r} \psi(\mathbf{r}, 0) \exp\left(-i\frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right) = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{\sigma^2(\mathbf{p} - \mu\mathbf{v})^2}{\hbar^2}\right)$$

és

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \left(2\pi \left(\sigma + \frac{i\hbar t}{2\mu\sigma}\right)^2\right)^{-\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{\left(\mathbf{r} - \frac{2i\sigma^2\mu\mathbf{v}}{\hbar}\right)^2}{4\left(\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2\mu}\right)} - \frac{\sigma^2\mu^2 v^2}{\hbar^2}\right)$$

Kaotikus rendszerek a klasszikus mechanikában: kettős inga, Szinaj-biliárd, lökdösött rotátor

5. hét

5.1. Az elektronspin nemrelativisztikus elmélete

A saját impulzusmomentummal is rendelkező elektron teljes impulzusmomentuma az $\hat{\mathbf{L}}$ pályapulzusmomentum és az $\hat{\mathbf{S}}$ spinmomentum összege.

5.1.1. Az impulzusmomentum sajátértékproblémájának algebrai megoldása

$$\begin{aligned} [\hat{J}_k, \hat{J}_l] &= i\hbar\epsilon_{klm}\hat{J}_m \\ [\hat{J}_k, \hat{J}^2] &= 0, \quad \hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \end{aligned}$$

Legyenek a $|j, m\rangle$ normált állapotok \hat{J}_z és \hat{J}^2 közös sajátállapotai.

$$\begin{aligned} \hat{J}_z |j, m\rangle &= J_z(m) |j, m\rangle \\ \hat{J}^2 |j, m\rangle &= J^2(j) |j, m\rangle \end{aligned}$$

Legyen

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y$$

és

$$\hat{J}_- = \hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$$

$$[\hat{J}_+, \hat{J}^2] = 0, \quad [\hat{J}_-, \hat{J}^2] = 0$$

$$\begin{aligned} [\hat{J}_+, \hat{J}_z] &= [\hat{J}_x, \hat{J}_z] + i[\hat{J}_y, \hat{J}_z] = -i\hbar\hat{J}_y - \hbar\hat{J}_x = -\hbar\hat{J}_+ \\ \hat{J}_+\hat{J}_z - \hat{J}_z\hat{J}_+ &= -\hbar\hat{J}_+, \quad \hat{J}_z\hat{J}_+ = \hat{J}_+\hat{J}_z + \hbar\hat{J}_+ \end{aligned}$$

$$\hat{J}_z\hat{J}_+ |j, m\rangle = \hat{J}_+\hat{J}_z |j, m\rangle + \hbar\hat{J}_+ |j, m\rangle = (J_z(m) + \hbar) \hat{J}_+ |j, m\rangle$$

$$\hat{J}_z\hat{J}_- = \hat{J}_-\hat{J}_z - \hbar\hat{J}_-, \quad \hat{J}_z\hat{J}_- |j, m\rangle = (J_z(m) - \hbar) \hat{J}_- |j, m\rangle$$

Ha $\hat{J}_+ |j, m\rangle$ nem nulla, akkor $J_z(m) + \hbar$ is sajátértéke \hat{J}_z -nek, ha pedig $\hat{J}_- |j, m\rangle$ nem nulla, akkor $J_z(m) - \hbar$ is sajátértéke \hat{J}_z -nek.

Azonban

$$\langle \psi | (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2) | \psi \rangle = \langle \psi | (\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2) | \psi \rangle \geq 0$$

ezért $|\psi\rangle = |j, m\rangle$ esetén

$$J^2(j) \geq J_z(m)^2$$

Emiatt valamilyen $m = m_{max}$ esetén

$$\hat{J}_+ |j, m_{max}\rangle = 0$$

Hogyan lehetséges ez?

$$\begin{aligned} \left| \hat{J}_+ |j, m\rangle \right|^2 &= \langle j, m | \hat{J}_+^\dagger \hat{J}_+ |j, m\rangle = \langle j, m | \hat{J}_- \hat{J}_+ |j, m\rangle \\ &= \langle j, m | \left(\hat{J}_x - i\hat{J}_y \right) \left(\hat{J}_x + i\hat{J}_y \right) |j, m\rangle = \langle j, m | \left(\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + i(\hat{J}_x \hat{J}_y - \hat{J}_x \hat{J}_y) \right) |j, m\rangle \\ &= \langle j, m | \left(\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z \right) |j, m\rangle = J^2(j) - J_z^2(m) - \hbar J_z(m) \end{aligned}$$

Tehát

$$\hat{J}_+ |j, m_{max}\rangle = 0 \Rightarrow J^2(j) - J_z^2(m_{max}) - \hbar J_z(m_{max}) = 0$$

$J_z(m_{max})$ mellett sajátértékek $J_z(m_{max}) - \hbar$, $J_z(m_{max}) - 2\hbar$, $J_z(m_{max}) - 3\hbar$ stb., a hozzájuk tartozó $\hat{J}_- |j, m_{max}\rangle$, $\hat{J}_-^2 |j, m_{max}\rangle$, $\hat{J}_-^3 |j, m_{max}\rangle$ stb. sajátállapotokkal.

Valamilyen k egész számra azonban

$$\hat{J}_- \hat{J}_-^k |j, m_{max}\rangle = 0$$

kell hogy legyen, mert különben \hat{J}_z -nek tetszőlegesen nagy abszolút értékű sajátértékei lennének.

$$\begin{aligned} \left| \hat{J}_- |j, m\rangle \right|^2 &= \langle j, m | \hat{J}_-^\dagger \hat{J}_- |j, m\rangle = \langle j, m | \hat{J}_+ \hat{J}_- |j, m\rangle \\ &= \langle j, m | \left(\hat{J}_x + i\hat{J}_y \right) \left(\hat{J}_x - i\hat{J}_y \right) |j, m\rangle = \langle j, m | \left(\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 - i(\hat{J}_x \hat{J}_y - \hat{J}_x \hat{J}_y) \right) |j, m\rangle \\ &= \langle j, m | \left(\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z \right) |j, m\rangle = J^2(j) - J_z^2(m) + \hbar J_z(m) \end{aligned}$$

Tehát

$$\hat{J}_- \hat{J}_-^k |j, m_{max}\rangle = 0 \Rightarrow J^2(j) - (J_z(m_{max}) - k\hbar)^2 + \hbar (J_z(m_{max}) - k\hbar) = 0$$

Az előbbi egyenlettel összevetve

$$J_z(m_{max}) = \frac{k\hbar}{2}$$

és

$$J^2(j) = \frac{k}{2} \left(\frac{k}{2} + 1 \right) \hbar^2$$

valamint

$$J_z(m) = m\hbar, \quad m = -\frac{k}{2}, -\frac{k}{2} + 1, \dots, \frac{k}{2}$$

\hat{J}^2 sajátállapotainak j indexét szokásosan a $\frac{k}{2}$ számmal azonosítjuk.

5.1.2. Az elektronspin operátora és sajátérték-egyenlete

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\frac{3\hbar^2}{4} = \hbar^2 s(s+1), \quad s = \frac{1}{2}$$

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_+ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$\begin{aligned}\hat{S}_+ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \hat{S}_- \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \hat{S}_- \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0\end{aligned}$$

Az elektron anomális mágneses momentuma:

$$\mathbf{M}^S = -\frac{q_e}{\mu_e} \mathbf{S}$$

A z komponens sajátértékei

$$M_z^S = \pm \frac{q_e \hbar}{2\mu_e}$$

A teljes mágneses momentum

$$M_z = M_z^L + M_z^S = -\frac{q_e}{2\mu_e} (m + 2s_z)$$

5.1.3. Impulzusnyomatékok összeadása: a teljes impulzusnyomaték

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$$

$\hat{\mathbf{L}}$ és $\hat{\mathbf{S}}$ különböző Hilbert-téren hatnak, ezért egymással felcserélhetők.

$$[\hat{J}_k, \hat{J}_l] = i\hbar \epsilon_{klm} \hat{J}_m$$

$$[\hat{J}_k, \hat{J}^2] = 0, \quad \hat{J}^2 = (\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}})^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + \hat{L}_+ \hat{S}_- + \hat{L}_- \hat{S}_+$$

$$[\hat{L}_k, \hat{L}_l] = i\hbar \epsilon_{klm} \hat{L}_m$$

$$[\hat{L}_k, \hat{L}^2] = 0$$

$$[\hat{S}_k, \hat{S}_l] = i\hbar \epsilon_{klm} \hat{S}_m$$

$$[\hat{S}_k, \hat{S}^2] = 0$$

Egymással kölcsönösen felcserélhető operátorok:

$$\hat{J}_z, \hat{L}_z, \hat{S}_z, \hat{L}^2, \hat{S}^2$$

vagy

$$\hat{J}_z, \hat{J}^2, \hat{L}^2, \hat{S}^2$$

Mindkét operátorhalmaz sajátállapotai ugyanazt a Hilbert-teret feszítik ki.

Az első esetben a közös sajátállapot-rendszer

$$|l, m, s, s_z\rangle = |l, m\rangle \otimes |s, s_z\rangle$$

Ekkor

$$\hat{L}^2 |l, m, s, s_z\rangle = l(l+1)\hbar^2 |l, m, s, s_z\rangle$$

$$\hat{L}_z |l, m, s, s_z\rangle = m\hbar |J, M, l, s\rangle$$

$$\hat{S}^2 |l, m, s, s_z\rangle = s(s+1)\hbar^2 |l, m, s, s_z\rangle$$

$$\hat{S}_z |l, m, s, s_z\rangle = s_z\hbar |J, M, l, s\rangle$$

Végül \hat{J}_z sajátértéke $M\hbar$, ahol

$$M = m + s_z$$

A pályamomentum esetén koordinátareprezentációt, a spinmomentum esetén impulzuszmomentum-reprezentációt használva:

$$\left| l, m, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \\ 0 \end{pmatrix}$$

A második esetben a sajátállapotok

$$|J, M, l, s\rangle$$

ami azt jelenti, hogy

$$\hat{J}^2 |J, M, l, s\rangle = J(J+1)\hbar^2 |J, M, l, s\rangle$$

$$\hat{J}_z |J, M, l, s\rangle = M\hbar |J, M, l, s\rangle$$

$$\hat{L}^2 |J, M, l, s\rangle = l(l+1)\hbar^2 |J, M, l, s\rangle$$

$$\hat{S}^2 |J, M, l, s\rangle = s(s+1)\hbar^2 |J, M, l, s\rangle$$

Adott l és s esetében mi lehet J értéke?

Ha $M = -l - s$:

$$|l, -l, s, -s\rangle = |J, -J, l, s\rangle, \quad J = l + s$$

Ha $M = -l - s + 1$:

$$|l, -l+1, s, -s\rangle \text{ és } |l, -l, s, -s+1\rangle$$

ugyanazt az alteret feszítik ki, mint

$$|J, -J + 1, l, s\rangle, \text{ ahol } J = l + s \text{ és } |J, -J, l, s\rangle, \text{ ahol } J = l + s - 1$$

Ahogy M -et növeljük, a lehetséges sajátállapotok száma mindaddig növekszik, míg $M + l + s < 2\min(l, s)$. Minden újabb állapot újabb lehetséges J értéket jelent. A legkisebb lehetséges J ezek szerint

$$J_{min} = l + s - 2\min(l, s) = |l - s|$$

tehát J lehetséges értékei

$$J = |l - s|, |l - s| + 1, \dots, l + s$$

Valóban, az állapotok teljes száma

$$\sum_{J=|l-s|}^{l+s} (2J + 1) = (2l + 1)(2s + 1)$$

5.1.4. Az elektromágneses térben mozgó elektron Hamilton-operátora

\mathbf{E} elektromos és \mathbf{B} mágneses térben mozgó klasszikus tömegpontra a

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

Lorentz-erő hat. Ha bevezetjük az \mathbf{A} vektorpotenciált és a ϕ skalárpotenciált a

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

és

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}$$

összefüggésekkel, akkor a Hamilton-függvény (az energia a koordinátákkal és impulzusokkal kifejezve)

$$H = \frac{(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2}{2\mu} + q\phi$$

Ennek mintájára a kvantummechanikában

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - q\hat{\mathbf{A}})^2}{2\mu} + q\hat{\phi}$$

Mértéktranszformáció:

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla \xi, \quad \phi \rightarrow \phi - \frac{\partial \xi}{\partial t}$$

Töltött részecskének az elektromágneses térrel való kölcsönhatása a mértékelméletek (v.ö. standard modell) általános sémája szerint is származtatható:

- Adott egy anyagi rendszer egzakt globális szimmetriája. Jelen esetben ez a szimmetria a komplex hullámfüggvény fázisának tetszőleges megválasztását jelenti.

$$\psi \rightarrow \psi e^{i\delta}$$

- A globális szimmetria lokálissá tehető (most $\delta = \delta(\mathbf{r}, t)$), ha a deriváltakat mértékterek bevezetésével kovariánssá tesszük. A fázis deriváltját a mértéktér mértéktranszformációja kompenzálja. Jelen esetben a mértéktér a négyespotenciál (a skalárpotenciál és a vektorpotenciál).

$$\nabla \rightarrow \nabla + Q\mathbf{A}, \quad \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} - Q\phi$$

(Itt $Q = -iq/\hbar$ a q töltéssel arányos mennyiség.)

$$\begin{aligned} (\nabla + Q\mathbf{A}) \psi e^{i\delta(\mathbf{r}, t)} &= (\nabla \psi) e^{i\delta(\mathbf{r}, t)} + \psi e^{i\delta(\mathbf{r}, t)} i \nabla \delta(\mathbf{r}, t) + Q\mathbf{A} \psi e^{i\delta(\mathbf{r}, t)} \\ &= \left(\nabla \psi + Q \left[\mathbf{A} + \frac{i}{Q} \nabla \delta(\mathbf{r}, t) \right] \psi \right) e^{i\delta(\mathbf{r}, t)} \end{aligned}$$

- A mértéktér fizikai mező. A lokális szimmetria követelménye tehát egyértelműen meghatározza a mértéktérrel való kölcsönhatást.

\mathbf{A} vagy \mathbf{B} a fizikailag létező mező? Az Aharonov-Bohm-effektus.

Interferencia két résen:

- Elektromágneses tér nélkül az interferáló hullámok legyenek ψ_1 ill. ψ_2 . Közelíthetjük ezeket pl. síkhullámmal:

$$\psi_1 = e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}} \quad \psi_2 = e^{i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}}$$

ahol \mathbf{k}_1 és \mathbf{k}_2 nagysága azonos, iránya különböző.

- Bekapcsoljuk a mágneses teret. Tegyük fel, hogy a töltött részecske a tér nem egyszeresen összefüggő tartományában mozoghat úgy, hogy ott a mágneses indukció nulla. A közbezárt tartományokban van mágneses indukció, ezért egy ilyen tartomány körül integrálva

$$\oint \mathbf{A} ds = \int \nabla \times \mathbf{A} d\mathbf{f} = \int \mathbf{B} d\mathbf{f} \neq 0$$

Ez éppen a mágneses fluxus.

- Mágneses tér jelenlétében $\psi_1 \exp\left(i\frac{q}{\hbar} \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{A} d\mathbf{s}\right)$ ill. $\psi_2 \exp\left(i\frac{q}{\hbar} \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{A} d\mathbf{s}\right)$ lesznek a megoldás. A hullámok fáziskülönbsége

$$\frac{q}{\hbar} \oint \mathbf{A} d\mathbf{s}$$

értékkel megváltozik.

Ahol \mathbf{B} nullától különbözik, ott a részecske megtalálási valószínűsége nulla. A mágneses tér jelenléte mégis mérhető változást okoz.

Fluxuskvantálás szupravezető gyűrűben: a szupravezető belsejében mind az elektromos, mind a mágneses tér nulla. Emiatt a mágneses tér bekapcsolásakor a fáziskülönbségek csak 2π egész számú többszörösével változhatnak:

$$\frac{q}{\hbar} \oint \mathbf{A} d\mathbf{s} = 2n\pi$$

($q = -2q_e$ a Cooper-párok töltése)

Fluxuskvantum:

$$\Phi_0 = \frac{h}{2q_e}$$

5.1.5. Az elektron állapotegyenlete. A Pauli-egyenlet

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{q}{2\mu}(\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} + \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}) + \frac{q^2}{2\mu}\mathbf{A}^2 + q\hat{\phi}$$

$$\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla\mathbf{A}$$

Homogén mágneses térben

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

írható. Ekkor $\nabla\mathbf{A} = 0$ és

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{q}{2\mu}\mathbf{B}(\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}) + \frac{q^2}{8\mu}(\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2 + q\hat{\phi}$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{q}{2\mu}\mathbf{B}\hat{\mathbf{L}} + \frac{q^2}{8\mu}(\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2 + q\hat{\phi}$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\hat{\mathbf{p}}^2 - \mathbf{B}\hat{\mathbf{M}}^L + \frac{q^2}{8\mu}(\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2 + q\hat{\phi}$$

A spinnel kapcsolatos mágneses nyomatékkal együtt:

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\hat{\mathbf{p}}^2 - \mathbf{B}(\hat{\mathbf{M}}^L + \hat{\mathbf{M}}^S) + \frac{q^2}{8\mu}(\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2 + q\hat{\phi}$$

azaz

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{q}{2\mu}\mathbf{B}(\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) + \frac{q^2}{8\mu}(\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2 + q\hat{\phi}$$

Pauli-egyenlet:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi - \frac{q}{2\mu}\mathbf{B}(\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}})\Psi + \frac{q^2}{8\mu}(\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2\Psi + q\hat{\phi}\Psi = 0$$

Spin-pálya kölcsönhatás:

$$E_{sp} = \mathbf{M}^S(\mathbf{v} \times \mathbf{E})$$

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi = -\frac{\mathbf{r}}{r} \frac{d\phi}{dr}$$

$$E_{sp} = -\frac{1}{\mu r} \frac{d\phi}{dr} \mathbf{M}^S(\mathbf{v} \times \mathbf{r}) = \frac{1}{\mu r} \frac{d\phi}{dr} \mathbf{M}^S \mathbf{L}$$

$$\mathbf{M}^S = \frac{q}{\mu} \mathbf{S}$$

$$E_{sp} = \frac{q}{\mu^2 r} \frac{d\phi}{dr} \hat{\mathbf{S}} \hat{\mathbf{L}}$$

Helyesen (ld. Dirac-egyenlet):

$$E_{sp} = \frac{q}{2\mu^2 r} \frac{d\phi}{dr} \hat{\mathbf{S}} \hat{\mathbf{L}}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2\mu} \Delta - \frac{q}{2\mu} \mathbf{B} \left(\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}} \right) + \frac{q}{2\mu^2 r} \frac{d\phi}{dr} \hat{\mathbf{S}} \hat{\mathbf{L}} + \frac{q^2}{8\mu} (\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2 + q\hat{\phi}$$

6. hét

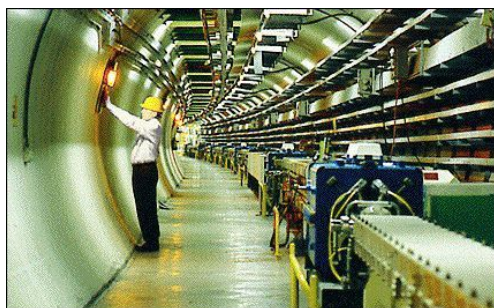
6.1. Ütközések elmélete

A kölcsönhatásokra vonatkozó tudásunk jelentős részben az egymással ütköző részecskék tanulmányozásából ered. A szóródó részek száma és szög szerinti eloszlása alapján nagy pontossággal ellenőrizhetők a kölcsönhatásra tett feltevések.

Rutherford-szórás
Részecskegyorsítók



34. ábra. CERN, a LEP (Large Electron-Positron collider) madártávlatból.



35. ábra. CERN, LEP. A gyorsítócső alagútja.

6.1.1. A hatáskeresztmetszet

6.1.2. A parciális hullámok módszere

6.1.3. A kisenergiájú részecskék szóródása

6.1.4. A Born-közelítés

Az E energiájú potenciálszórást leíró Schrödinger-egyenlet:

$$\Delta\psi + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) \psi = 0$$

A $k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$ és $U(r) = \frac{2\mu V(r)}{\hbar^2}$ jelölésekkel:

$$\Delta\psi + (k^2 - U(r)) \psi = 0$$

Nagy energián a potenciális energia kicsi a teljes energiához képest, ezért $U(r)$ hatását kis korrekciónak tekintjük. A korrekciók nagyságrendjének számon tartására bevezetjük a λ paramétert (vö. perturbációszámítás):

$$\begin{aligned} \Delta\psi + (k^2 - \lambda U(r)) \psi &= 0 \\ \psi &= e^{ikz} + \lambda\psi_1 + \lambda^2\psi_2 + \dots \end{aligned}$$

Feltételezzük, hogy az egyenletnek λ -ban analitikus megoldása létezik, ha $\lambda \in [0, 1]$. A fizikai megoldást $\lambda = 1$ helyettesítéssel kapjuk. λ hatványait összegyűjtve adódik, hogy

$$(\Delta + k^2) e^{ikz} + \lambda [(\Delta + k^2) \psi_1 - U(r)e^{ikz}] + \lambda^2 [(\Delta + k^2) \psi_2 - U(r)\psi_1] + \dots$$

λ^0 együtthatója:

$$(\Delta + k^2) e^{ikz} = 0,$$

ami teljesül.

λ^1 együtthatója:

$$(\Delta + k^2) \psi_1 = U(r)e^{ikz}$$

Ez a ψ_1 függvényre vonatkozó Helmholtz-egyenlet. A végtelenben eltűnő megoldása:

$$\psi_1 = -\frac{1}{4\pi} \int d^3\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(r') e^{ikz'}$$

Helyezzük az origót a szórócentrumba! Feltéve, hogy a potenciál rövid hatótávolságú, az integrálhoz csak az a tartomány ad lényeges járulékot, ahol

$$|\mathbf{r}'| \ll |\mathbf{r}|$$

Ekkor viszont

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r - \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{r}$$

és

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \approx \frac{e^{ikr}}{r} \exp\left(ik \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{r}\right)$$

Másrészt

$$\begin{aligned} kz' &= \mathbf{k}\mathbf{r}' \\ k \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{r} &= \mathbf{k}'\mathbf{r}' \end{aligned}$$

így

$$\psi_1 = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3\mathbf{r}' \exp(i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{r}') U(r')$$

6.1.5. Rezonancia-jelenségek a részecskék ütközésénél

6.1.6. Alagút-jelenség

7. hét

7.1. Perturbációszámítás

Az időfüggő vagy időfüggetlen Schrödinger-egyenlet gyakran nem oldható meg egzakt, analitikus formában. Emiatt nagy jelentősége van a közelítő ill. numerikus megoldási módszereknek. Az egyik legelterjedtebb és legtöbbször alkalmazott közelítő megoldási eljárás a perturbációszámítás („perturbáció” = „kis zavar”). Ilyenkor a megoldandó feladat megoldását valamilyen - lehetőleg attól csak kevésbé különböző - másik, egzaktul megoldható probléma ismert megoldásából kiindulva keressük. Ez a módszer sokszor hatékony, ha az ismert kiindulási feladat és a megoldandó feladat megoldásai hasonló jellegűek. (Más esetekben előfordul viszont, hogy a megoldások jellege alapvetően eltér. Emiatt nem lehet pl. a kölcsönhatás perturbatív figyelembevételével eljutni a szabad elektronok problémájának megoldásától a szupravezetés jelenségéig.)

7.1.1. Időfüggetlen perturbációszámítás

Tegyük fel pl., hogy ismerjük a $\hat{H}^{(0)}$ Hamilton-operátor sajátérték-problémájának teljes megoldását, azaz a

$$\hat{H}^{(0)} |\phi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\phi_n^{(0)}\rangle$$

sajátérték-egyenletet kielégítő $E_n^{(0)}$ sajátértékeket és $|\phi_n^{(0)}\rangle$ sajátállapotokat. Keressük a $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)}$ Hamilton-operátor E_n sajátértékeit és $|\phi_n\rangle$ sajátállapotait. Bevezetjük az ϵ perturbációs paramétert és feltételezzük, hogy a $\hat{H}(\epsilon) = \hat{H}^{(0)} + \epsilon \hat{H}^{(1)}$ Hamilton-operátor sajátértékei és sajátfüggvényei ϵ -ban analitikus módon mennek át $E_n^{(0)}$ -ből E_n -be ill. $|\phi_n^{(0)}\rangle$ -ből $|\phi_n\rangle$ -be, ha ϵ 0-tól 1-ig változik (láthatóan $\hat{H}(\epsilon = 0) = \hat{H}^{(0)}$ és $\hat{H}(\epsilon = 1) = \hat{H}$). Ekkor a

$$\hat{H}(\epsilon) |\phi_n(\epsilon)\rangle = E_n(\epsilon) |\phi_n(\epsilon)\rangle$$

sajátérték-egyenlet mindkét oldalát az ϵ perturbációs paraméter szerint Taylor-sorba fejtjük és a sorfejtés egyes rendjeiben a sajátérték és a sajátállapot sorfejtési együtthatóira adódó egyenleteket sorra megoldjuk. Ezzel megkapjuk $E_n(\epsilon)$ -t és $|\phi_n(\epsilon)\rangle$ -t ϵ szerinti Taylor-sor formájában, melybe $\epsilon = 1$ -et helyettesítve kapjuk az eredeti sajátérték-feladat megoldását. Ha a teljes Taylor-sort sikerül meghatározni, és az konvergencia az $\epsilon = 1$ helyen, akkor a megoldás egzakt. Gyakorlatban többnyire a sor egyes rendjeit vagy egyes tagok járulékaiknak teljes sorát lehet meghatározni, ezért a perturbációszámítás közelítő módszer.

A fent leírtak alapján kiszámítjuk a sajátértékek és a sajátállapotok két első korrekcióját.

$$E_n(\epsilon) = \sum_{j=0}^{\infty} E_n^{(j)} \epsilon^j = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} \epsilon + E_n^{(2)} \epsilon^2 + \dots$$

$$|\phi_n(\epsilon)\rangle = \sum_{j=0}^{\infty} \epsilon^j |\phi_n^{(j)}\rangle = |\phi_n^{(0)}\rangle + \epsilon |\phi_n^{(1)}\rangle + \epsilon^2 |\phi_n^{(2)}\rangle + \dots$$

$$(\hat{H}^{(0)} + \epsilon \hat{H}^{(1)}) (|\phi_n^{(0)}\rangle + \epsilon |\phi_n^{(1)}\rangle + \epsilon^2 |\phi_n^{(2)}\rangle + \dots) = (E_n^{(0)} + E_n^{(1)}\epsilon + E_n^{(2)}\epsilon^2 + \dots) (|\phi_n^{(0)}\rangle + \epsilon |\phi_n^{(1)}\rangle + \epsilon^2 |\phi_n^{(2)}\rangle + \dots)$$

Nulladrend:

$$\hat{H}^{(0)} |\phi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\phi_n^{(0)}\rangle$$

Első rend:

$$(H^{(0)} - E_n^{(0)}) |\phi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)} |\phi_n^{(0)}\rangle - \hat{H}^{(1)} |\phi_n^{(0)}\rangle$$

Másodrend:

$$(H^{(0)} - E_n^{(0)}) |\phi_n^{(2)}\rangle = E_n^{(2)} |\phi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(1)} |\phi_n^{(1)}\rangle - \hat{H}^{(1)} |\phi_n^{(1)}\rangle$$

k -adrend:

$$(H^{(0)} - E_n^{(0)}) |\phi_n^{(k)}\rangle = (\text{alacsonyabb } (0, 1, \dots, k-1) \text{ rendű járulékok})$$

A nulladrend megoldását feltevés szerint ismerjük. Tegyük fel, hogy csak kötött állapotok vannak és azok 1-re normáltak:

$$\langle \phi_n^{(0)} | \phi_n^{(0)} \rangle = 1$$

Az első rend megoldása:

- Az egyenletet balról $\langle \phi_n^{(0)} |$ -al szorozva a baloldalon nullát kapunk. Ez meghatározza $E_n^{(1)}$ értékét:

$$E_n^{(1)} = \langle \phi_n^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \phi_n^{(0)} \rangle$$

- Az egyenletet balról $\langle \phi_j^{(0)} |$ -al szorozzuk ($j \neq n$). Feltéve, hogy $E_j^{(0)} \neq E_n^{(0)}$, ebből megkapjuk a $\langle \phi_j^{(0)} | \phi_n^{(1)} \rangle$ vetületet:

$$\langle \phi_j^{(0)} | \phi_n^{(1)} \rangle = -\frac{\langle \phi_j^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \phi_n^{(0)} \rangle}{E_j^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

- A $\langle \phi_n^{(0)} | \phi_n^{(1)} \rangle$ vetületet az egyenlet nem határozza meg (ez a határozatlanság a normálási tényező tetszőleges voltának következménye), ezt nullának választjuk. Ekkor az állapot normája első rendben változatlan.

- Mivel $|\phi_j^{(0)}\rangle$ -ok teljes rendszert alkotnak,

$$|\phi_n^{(1)}\rangle = - \sum_{j \neq n} \frac{\langle \phi_j^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \phi_n^{(0)} \rangle}{E_j^{(0)} - E_n^{(0)}} |\phi_j^{(0)}\rangle$$

A magasabb rendek egyenleteinek megoldása során ugyanezeket a lépéseket követjük. Ilyen módon kapjuk az energiasajátérték másodrendű korrekciójára:

$$E_n^{(2)} = - \sum_{j \neq n} \frac{|\langle \phi_j^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \phi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_j^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

Az alapállapot esetén ez mindig negatív.

7.1.2. Időfüggetlen perturbációszámítás elfajulás esetén

Elfajulás (degeneráció): különböző sajátállapotokhoz tartozó sajátértékek egyenlőek. Véletlen elfajulás és szimmetriával kapcsolatos elfajulás.

Legyenek az $E_n^{(0)}$ -hoz tartozó (ortonormált) elfajult állapotok $|\phi_{n,i}^{(0)}\rangle$ -k, tehát

$$\hat{H}^{(0)} |\phi_{n,i}^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\phi_{n,i}^{(0)}\rangle$$

Természetesen a nulladrendű egyenletet a $|\phi_{n,i}^{(0)}\rangle$ állapotok bármely lineáris kombinációja is kielégíti. A perturbáció (azaz $\hat{H}^{(1)}$) megszüntetheti a degenerációt, tehát a $|\phi_{n,i}\rangle$ állapotokhoz különböző $E_{n,i}$ energiák tartozhatnak. Ekkor az $\epsilon \rightarrow 0$ határesetben az $|\phi_{n,i}(\epsilon)\rangle$ állapotok jól meghatározott lineáris kombinációkat választanak ki. Legyenek ezek

$$|\phi_{n,i}(0)\rangle = \sum_j a_{ij} |\phi_{n,i}^{(0)}\rangle$$

Itt a_{ij} unitér mátrix, mérete az elfajult sajátértékhez tartozó lineárisan független állapotok számával egyenlő. Az energiaszintek és energiák sorfejtése ϵ szerint:

$$E_{n,i}(\epsilon) = E_n^{(0)} + E_{n,i}^{(1)}\epsilon + E_{n,i}^{(2)}\epsilon^2 + \dots$$

$$|\phi_{n,i}(\epsilon)\rangle = |\phi_{n,i}(0)\rangle + \epsilon |\phi_{n,i}^{(1)}\rangle + \epsilon^2 |\phi_{n,i}^{(2)}\rangle + \dots$$

A sajátértékegyenlet ϵ -ban első rendű korrekciója:

$$(H^{(0)} - E_n^{(0)}) \left| \phi_{n,i}^{(1)} \right\rangle = E_{n,i}^{(1)} \left| \phi_{n,i}^{(0)} \right\rangle - \hat{H}^{(1)} \left| \phi_{n,i}^{(0)} \right\rangle$$

Szorozzuk meg ezt balról a $\left\langle \phi_{n,j}^{(0)} \right|$ állapottal! Az egyenlet baloldala eltűnik, a jobboldalból pedig

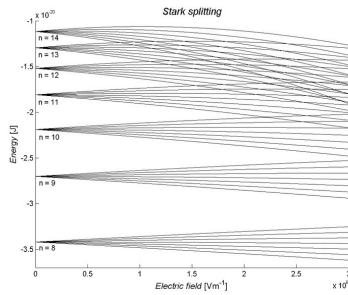
$$\sum_k \left\langle \phi_{n,j}^{(0)} \right| \hat{H}^{(1)} \left| \phi_{n,k}^{(0)} \right\rangle a_{ik} = E_{n,i}^{(1)} a_{ij}$$

Láthatóan $E_{n,i}^{(1)}$ a $\left\langle \phi_{n,j}^{(0)} \right| \hat{H}^{(1)} \left| \phi_{n,k}^{(0)} \right\rangle$ mátrix sajátértéke, a_{ij} pedig (rögzített i -re) a sajátvektora.

Hidrogénatom elektromos térben: a Stark-effektus

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - q_e E z$$

Paritás, lineáris és nemlineáris Stark-effektus



36. ábra. A lineáris Stark-effektus. Johannes Stark (1874-1957)

7.1.3. Időfüggő perturbációs számítás

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = (\hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)}(t)) |\psi\rangle$$

Mint az időfüggetlen esetben, ezúttal is bevezetjük az ϵ perturbációs paramétert és az

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = (\hat{H}^{(0)} + \epsilon \hat{H}^{(1)}(t)) |\psi\rangle$$

egyenlet megoldását ϵ szerint sorbafejtjük:

$$|\psi\rangle = |\psi^{(0)}\rangle + \epsilon |\psi^{(1)}\rangle + \dots$$

Nulladrend:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi^{(0)}\rangle = \hat{H}^{(0)} |\psi^{(0)}\rangle$$

Első rend:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}^{(0)} \right) |\psi^{(1)}\rangle = \hat{H}^{(1)} |\psi^{(0)}\rangle$$

Periodikus perturbáció:

$$\hat{H}^{(1)}(t) = \begin{cases} \hat{K}e^{\pm i\omega t} & \text{ha } 0 \leq t \leq \tau \\ 0, & \text{ha } t < 0, t > \tau \end{cases}$$

Átmeneti valószínűség:

$$W_{nm}(\tau) = \frac{2\pi}{\hbar} |K_{nm}|^2 \tau \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega)$$

Folytonos végállapotok esetén:

$$W(\tau) = \frac{2\pi}{\hbar} |K_{nm}|^2 \tau \rho(E_m \pm \hbar\omega)$$

7.1.4. Elektromágneses sugárzás kölcsönhatása atomokkal

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - q\hat{\mathbf{A}})^2}{2\mu} + q\hat{\phi}$$

Coulomb-mértékben ($\nabla \mathbf{A} = 0$):

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{q_e}{\mu} \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}} + \frac{q_e^2}{2\mu} \mathbf{A}^2$$

$$\hat{H}^{(0)} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$\hat{H}^{(1)} = -\frac{q_e}{\mu} \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}$$

Elektromágneses hullám:

$$\mathbf{A} = \mathbf{e}A_0 \cos(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t) = \frac{1}{2} \mathbf{e}A_0 (e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} e^{i\omega t} + e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} e^{-i\omega t})$$

7.1.5. A törésmutató kvantumelmélete

Emlékeztető (klasszikus elektrodinamika):

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \nabla \mathbf{B} &= 0 \\ \epsilon_0 c^2 \nabla \times \mathbf{B} &= \mathbf{j}_k + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \\ \nabla \mathbf{D} &= \rho \\ \mathbf{D} &= \epsilon \epsilon_0 \mathbf{E} \\ \mathbf{D} &= \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}\end{aligned}$$

\mathbf{P} : polarizáció, a térfogategység dipólmomentuma

$$\begin{aligned}\mathbf{P} &= \epsilon_0 \chi \mathbf{E} \\ \epsilon &= 1 + \chi \\ \epsilon &= n^2\end{aligned}$$

Atom dipólmomentuma:

$$\begin{aligned}\mathbf{d} &= \alpha \mathbf{E}_{lok} \\ \mathbf{E}_{lok} &= \mathbf{E} + \frac{1}{3\epsilon_0} \mathbf{P} \\ \mathbf{P} &= N \mathbf{d} = N \alpha \left(\mathbf{E} + \frac{1}{3\epsilon_0} \mathbf{P} \right) \\ \mathbf{P} &= \frac{N \alpha}{1 - \frac{N \alpha}{3\epsilon_0}} \mathbf{E} \\ \chi &= \frac{\frac{N \alpha}{\epsilon_0}}{1 - \frac{N \alpha}{3\epsilon_0}} \\ \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} &= \frac{N \alpha}{3\epsilon_0} \\ \text{Ha } n \approx 1: \\ n^2 &= 1 + \frac{N \alpha}{\epsilon_0}\end{aligned}$$

ill.

$$n = 1 + \frac{N\alpha}{2\epsilon_0}$$

Az α atomi polarizálhatóság kiszámítása:

$$\Psi(t) = \psi_m e^{-i\omega_m t} - \frac{iaq_e}{2\hbar} \sum_n \omega_{nm} y_{nm} \left[\frac{e^{i(\omega_{nm} + \omega)t}}{\omega_{nm} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{nm} - \omega)t}}{\omega_{nm} - \omega} \right] \psi_n e^{-i\omega_n t}$$

$$\bar{\mathbf{d}} = q_e \langle \Psi | \mathbf{r} | \Psi \rangle$$

8. hét

8.1. A kvantummechanikai többtestprobléma. Atomok és molekulák elmélete

8.1.1. Sok részecskéből álló kvantummechanikai rendszer leírása

$$\Psi = \Psi(t, x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N; s_1, \dots, s_N)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

$$\hat{H} = \hat{E}_k + \hat{V} + \hat{U}$$

\hat{E}_k : kinetikus energia, \hat{V} : potenciális energia külső térben, \hat{U} : részecskék közötti kölcsönhatási energia

$$\hat{E}_k = \sum_{l=1}^N -\frac{\hbar^2}{2\mu_l} \Delta_l$$

$$\Delta_l = \frac{\partial^2}{\partial x_l^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_l^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_l^2}$$

$$\hat{V} = \hat{V}_1(\mathbf{r}_1) + \hat{V}_2(\mathbf{r}_2) + \dots + \hat{V}_N(\mathbf{r}_N) = \sum_{l=1}^N \hat{V}_l(\mathbf{r}_l)$$

$$\hat{U} = \hat{U}_{12}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \hat{U}_{13}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3) + \dots + \hat{U}_{N-1,N}(\mathbf{r}_{N-1} - \mathbf{r}_N) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1, l \neq k}^N \hat{U}_{kl}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l)$$

$$\hat{H} = \sum_{l=1}^N -\frac{\hbar^2}{2\mu_l} \Delta_l + \sum_{l=1}^N \hat{V}_l(\mathbf{r}_l) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1, l \neq k}^N \hat{U}_{kl}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l)$$

Időfüggetlen Schrödinger-egyenlet (v.ö. stacionárius állapotok):

$$\left[\sum_{l=1}^N -\frac{\hbar^2}{2\mu_l} \Delta_l + \sum_{l=1}^N \hat{V}_l(\mathbf{r}_l) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1, l \neq k}^N \hat{U}_{kl}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l) \right] \psi = E \psi$$

$\psi = \psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N; s_1, \dots, s_N)$: energia-sajátállapot.

A Hamilton-operátor nem függ a spinváltozóktól, ezért az energia-sajátfüggvény szorzat alakú:

$$\psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N; s_1, \dots, s_N) = \Phi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N) \chi(s_1, \dots, s_N)$$

ahol

$$\left[\sum_{l=1}^N -\frac{\hbar^2}{2\mu_l} \Delta_l + \sum_{l=1}^N \hat{V}_l(\mathbf{r}_l) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1, l \neq k}^N \hat{U}_{kl}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l) \right] \Phi = E\Phi$$

8.1.2. Azonos részecskék és a Pauli-elv

$$\xi_k = (x_k, y_k, z_k, s_k)$$

$$\hat{V}_i(\xi_i) = \hat{V}(\xi_i)$$

$$\hat{U}_{jk}(\xi_j, \xi_k) = \hat{U}(\xi_j, \xi_k)$$

$$\hat{H} = \sum_{l=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_l + \hat{V}(\xi_l) \right) + \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^{k-1} \hat{U}(\xi_k, \xi_j)$$

Azonos részecskék megkülönböztethetetlenek:

- a határozatlansági reláció miatt nem lehet őket nyomon követni és így korábbi önmagukkal azonosítani, így egyediségük megszűnik
- ezzel összhangban semmilyen mérhető mennyiség várható értéke ill. mért értékének valószínűsége nem változik, ha két azonos részecskét a rendszerben felcserélünk.
- ez utóbbi azt jelenti, hogy azonos részecskék rendszerének hullámfüggvénye két részecske felcserélésekor csak egy konstans, egységnyi abszolút értékű $K = e^{i\alpha}$ komplex számmal szorozódhat.

$$\Psi(x_1, \dots, \xi_l, \xi_k, \dots, \xi_N) = K \Psi(x_1, \dots, \xi_k, \xi_l, \dots, \xi_N)$$

$$\Psi(x_1, \dots, \xi_k, \xi_l, \dots, \xi_N) = K \Psi(x_1, \dots, \xi_l, \xi_k, \dots, \xi_N)$$

$$\Psi(x_1, \dots, \xi_l, \xi_k, \dots, \xi_N) = K^2 \Psi(x_1, \dots, \xi_l, \xi_k, \dots, \xi_N)$$

Tehát

$$K^2 = 1 \Rightarrow K = \pm 1$$

Tehát azonos részecskék rendszerének hullámfüggvénye két részecske felcserélésekor vagy nem változik (bozonok [foton, π -mezok, K -mezon stb.]),

$$\Psi(x_1, \dots, \xi_l, \xi_k, \dots, \xi_N) = \Psi(x_1, \dots, \xi_k, \xi_l, \dots, \xi_N)$$

vagy előjelet vált (fermionok [elektron, proton, neutron, kvarkok, neutrínók stb.]).

$$\Psi(x_1, \dots, \xi_l, \xi_k, \dots, \xi_N) = -\Psi(x_1, \dots, \xi_k, \xi_l, \dots, \xi_N)$$

Azonos részecskék energiasajátállapotai kölcsönhatásmentes esetben (perturbációszámítás nulla-dik közelítése, ha a részecskék kölcsönhatását perturbációnak tekinthetjük):

$$\hat{H}^{(0)} = \sum_{l=1}^N \hat{H}^{(0)}(l)$$

Itt $H^{(0)}(l)$ az l -edik részecske Hamilton-operátora:

$$\hat{H}^{(0)}(l) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_l + V(\xi_l)$$

Ha

$$\hat{H}^{(0)}(l)\phi_k(\xi_l) = E_k\phi_k(\xi_l)$$

akkor

$$\hat{H}^{(0)}\psi = E\psi$$

megoldása:

$$\psi = \phi_{k_1}(\xi_1)\phi_{k_2}(\xi_2)\dots\phi_{k_N}(\xi_N)$$

és

$$E = E_{k_1} + E_{k_2} + \dots + E_{k_N}$$

Ugyanehhez a sajátértékhez tartozik a

$$\phi_{k_1}(\xi_2)\phi_{k_2}(\xi_1)\dots\phi_{k_N}(\xi_N)$$

sajátfüggvény is, vagy általában

$$\phi_{k_1}(\xi_{j_1})\phi_{k_2}(\xi_{j_2})\dots\phi_{k_N}(\xi_{j_N})$$

ahol j_1, j_2, \dots, j_N az $1, 2, \dots, N$ számok permutációja.

Szimmetrikus hullámfüggvény (bozonok):

$$\psi = \sum_{j_1, j_2, \dots, j_N} \phi_{k_1}(\xi_{j_1})\phi_{k_2}(\xi_{j_2})\dots\phi_{k_N}(\xi_{j_N})$$

Antiszimmetrikus hullámfüggvény (fermionok):

$$\psi = \sum_{j_1, j_2, \dots, j_N} (-1)^P \phi_{k_1}(\xi_{j_1})\phi_{k_2}(\xi_{j_2})\dots\phi_{k_N}(\xi_{j_N})$$

Itt P a permutáció párossága (hány pár cseréjével lehet az adott j_1, j_2, \dots, j_N permutációt az $1, 2, \dots, N$ sorrendből megkapni). Ez éppen a determináns definíciója.

Slater-determináns (normálási tényezővel):

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{k_1}(\xi_1) & \phi_{k_1}(\xi_2) & \dots & \phi_{k_1}(\xi_N) \\ \phi_{k_2}(\xi_1) & \phi_{k_2}(\xi_2) & \dots & \phi_{k_2}(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k_N}(\xi_1) & \phi_{k_N}(\xi_2) & \dots & \phi_{k_N}(\xi_N) \end{vmatrix}$$



37. ábra. John Clark Slater (1900-1976)

8.1.3. A héliumatom

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_1 - \frac{2q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_2 - \frac{2q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}$$

$$r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$$

Az energia-sajátértékek és sajátfüggvények meghatározása perturbációszámítással:

$$\hat{H}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_1 - \frac{2q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_2 - \frac{2q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}$$

$$\hat{H}^{(1)} = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}$$

Nulladrendű megoldás:

$$\Psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_{k_1}(\xi_1) & \phi_{k_1}(\xi_2) \\ \phi_{k_2}(\xi_1) & \phi_{k_2}(\xi_2) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{k_1}(\xi_1)\phi_{k_2}(\xi_2) - \phi_{k_2}(\xi_1)\phi_{k_1}(\xi_2))$$

8.1.4. Közelítő módszerek atomok és molekulák energiaszintjeinek kiszámítására

Variációs eljárás

Ha $|\Psi\rangle$ tetszőleges normált állapot és E_0 az alapállapot energiája (legkisebb energiasajátérték), akkor

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \geq E_0$$

Ha ui. $|\Psi\rangle$ -t a $|\Phi_n\rangle$ energiasajátállapotok szerint kifejtjük,

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |\Phi_n\rangle$$

és ezzel

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \sum_j \sum_k c_j^* c_k \langle \Phi_j | \hat{H} | \Phi_k \rangle = \sum_j \sum_k c_j^* c_k E_j \delta_{jk} = \sum_j |c_j|^2 E_j \geq \sum_j |c_j|^2 E_0 = E_0$$

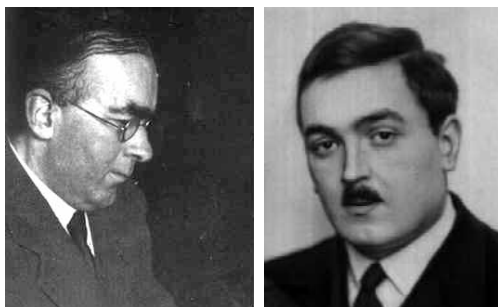
Ha tehát a $|\Psi\rangle$ állapotra feltételezünk valamilyen, szabad paramétereket tartalmazó koordinátareprezentációbeli függvényalakot (Ansatz-ot), és a paraméterek függvényében minimalizáljuk az energia várható értékét ebben az állapotban, akkor az alapállapoti energia ill. az alapállapoti hullámfüggvény egy közelítéséhez jutunk (Ritz-féle variációs módszer).



38. ábra. Walter Ritz (1878-1909). A Ritz-féle variációs módszer mellett az ő nevét őrzi a hidrogén spektrumvonalait megadó Rydberg-Ritz-formula is.

Hartree-Fock-közelítés

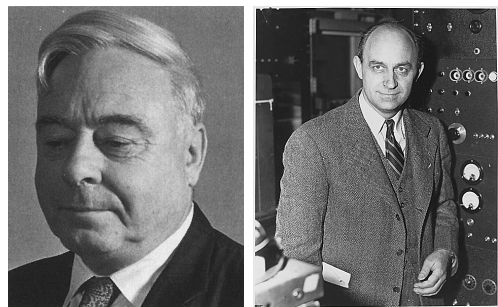
A variációs módszert alkalmazhatjuk más módon is: függetlenrészecske-hullámfüggvényt írunk fel (Slater-determináns), melyben az egyrészecske-hullámfüggvényeket az energia várható értékének minimumából határozzuk meg.



39. ábra. Douglas Rayner Hartree (1897-1958) és Vlagyimir Alekszandrovics Fok (1898-1974)

Thomas-Fermi eljárás

Az elektronok eloszlása (az atommaggal együtt) effektív elektromos potenciáalteret kelt. Ebben az effektív térben az elektronok eloszlását kváziklasszikus közelítés alapján határozzuk meg.



40. ábra. Llewellyn Hilleth Thomas (1903-1992) és Enrico Fermi (1901-1954)

Modern statisztikus módszer (főleg szilárdtestfizikában): a pseudopotenciálok módszere (Hohenberg-Kohn-tételek, Kohn-Sham módszer, lokális sűrűség közelítés).

8.1.5. Molekulák. A Born-Oppenheimer-közelítés

Born-Oppenheimer-közelítés: sorfejtés az $\eta = \left(\frac{\mu}{M}\right)^{1/4}$ paraméter szerint. Elektronok energiája már nulladrendben is járulékot ad, a rezgési energia η^2 -tel, a forgási energia η^4 -nel arányos.



41. ábra. Max Born (1882-1970) és Robert Oppenheimer (1904-1967)

N_e számú elektron és N_m számú atommag alkotta molekula esetén

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$$

$$\hat{H}_0 = \sum_{j=1}^{N_e} -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}_j} - \sum_{j=1}^{N_e} \sum_{n=1}^{N_m} \frac{Z_n q_e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_n|} + \sum_{j=2}^{N_e} \sum_{k=1}^{j-1} \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|} + \sum_{n=2}^{N_m} \sum_{l=1}^{n-1} \frac{Z_n Z_l q_e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_l|}$$

$$\hat{H}_1 = \sum_{n=1}^{N_m} -\frac{\hbar^2}{2M_n} \Delta_{\mathbf{R}_n}$$

Időfüggetlen Schrödinger-egyenlet:

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$$

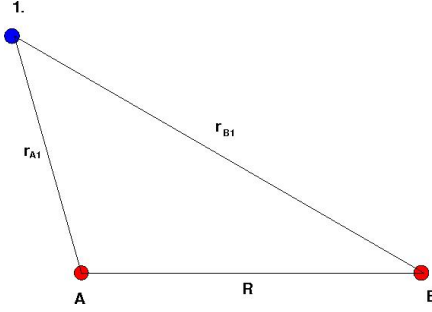
A Born-Oppenheimer közelítés nulladrendjében az energia-sajátfüggvények alakja

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{R})\phi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$$

ahol

$$\begin{aligned} \hat{H}_0\phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) &= \epsilon(\mathbf{R})\phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \\ \left(\hat{H}_1 + \epsilon(\mathbf{R})\right)\Phi(\mathbf{R}) &= E\Phi(\mathbf{R}) \end{aligned}$$

8.1.6. A hidrogén-molekula-ion (H_2^+)



42. ábra. Távolságok jelölése a hidrogén-molekula-ionban. A,B: atommagok, 1: elektron

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_1 - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{1}{r_{A1}} + \frac{1}{r_{B1}} - \frac{1}{R} \right]$$

Molekulapályák: itt a kétcentrumú vonzó potenciálban történő mozgásnak megfelelő energiasajátállapotok (egzakt analitikus megoldás létezik).

Molekulapályák közelítése atomi pályák lineáris kombinációjával (LCAO-módszer):

$$\phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = C (\phi_{100}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_A) + k\phi_{100}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_B)) = C (\phi_{100}(r_{A1}) + k\phi_{100}(r_{B1}))$$

Itt $C = C(k)$ normáló faktor, k pedig variációs paraméter.

$$C^2 \left[1 + k^2 + 2k \int d^3\mathbf{r}_1 \phi_{100}(r_{A1}) \phi_{100}(r_{B1}) \right] = 1$$

Az energia várható értéke:

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{H}_0 | \phi \rangle &= \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 R} + C^2 \left[(1 + k^2) \left(E_{100} - \int d^3\mathbf{r}_1 \phi_{100}^2(r_{A1}) \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{B1}} \right) \right. \\ &+ 2k \left(E_{100} \int d^3\mathbf{r}_1 \phi_{100}(r_{A1}) \phi_{100}(r_{B1}) - \int d^3\mathbf{r}_1 \phi_{100}(r_{A1}) \phi_{100}(r_{B1}) \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{B1}} \right) \left. \right] \end{aligned}$$

$$E_{100} = -\frac{\mu q_e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}$$

Minimalizálás k függvényében:

$$\frac{d}{dk} \langle \phi | \hat{H}_0 | \phi \rangle \propto (1 - k^2)$$

tehát $k = 1$ vagy $k = -1$. Az előbbi felel meg a minimumnak. Ekkor az elektron valószínűségeloszlása

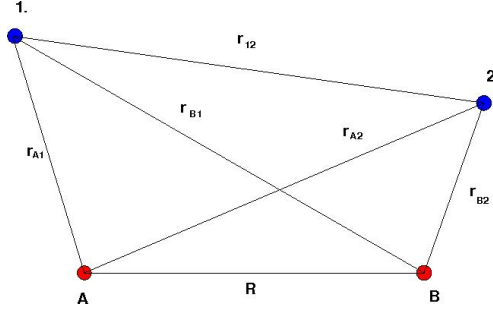
$$|\phi(\mathbf{R}, \mathbf{r})|^2 \propto \phi_{100}^2(r_{A1}) + \phi_{100}^2(r_{B1}) + 2\phi_{100}(r_{A1})\phi_{100}(r_{B1})$$

ami pozitív marad az atommagok között (kötő molekulapálya), míg $k = -1$ esetén a felezősíkban a valószínűségeloszlás nulla (nem kötő molekulapálya).

$$\begin{aligned} \epsilon(\mathbf{R}) &= \langle \phi | \hat{H}_0 | \phi \rangle = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \\ &+ \frac{\left(E_{100} - \int d^3\mathbf{r}_1 \phi_{100}^2(r_{A1}) \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{B1}} \right) + \left(E_{100} \int d^3\mathbf{r}_1 \phi_{100}(r_{A1})\phi_{100}(r_{B1}) - \int d^3\mathbf{r}_1 \phi_{100}(r_{A1})\phi_{100}(r_{B1}) \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{B1}} \right)}{1 + \int d^3\mathbf{r}_1 \phi_{100}(r_{A1})\phi_{100}(r_{B1})} \end{aligned}$$

Minimum létezése a magtávolság függvényében.

8.1.7. A hidrogén-molekula



43. ábra. Távolságok jelölése a hidrogén-molekulában. A,B: atommagok, 1,2: elektronok

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_2 - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{1}{r_{A1}} + \frac{1}{r_{A2}} + \frac{1}{r_{B1}} + \frac{1}{r_{B2}} - \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{R} \right]$$

$$\hat{H}_0\phi(\mathbf{R}, \xi) = \epsilon(\mathbf{R})\phi(\mathbf{R}, \xi)$$

Itt az atommagok R távolsága csak paraméterként szerepel. A ξ változó az elektron-koordináták és spinváltozók összefoglaló jelölése. Mivel a \hat{H}_0 Hamilton-operátor spinfüggetlen,

$$\phi(\mathbf{R}, \xi) = \phi'(\mathbf{R}, \mathbf{r})\chi(s_1, s_2)$$

Közelítsük $\phi(\mathbf{R}, \xi)$ -t az előbbi közelítő molekulapályákból felépített Slater-determinánssal! (C ismét normálási tényező)

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{R}, \xi) &= C \begin{vmatrix} (\phi_{100}(r_{A1}) + \phi_{100}(r_{B1}))\alpha(s_1) & (\phi_{100}(r_{A2}) + \phi_{100}(r_{B2}))\alpha(s_2) \\ (\phi_{100}(r_{A1}) + \phi_{100}(r_{B1}))\beta(s_1) & (\phi_{100}(r_{A2}) + \phi_{100}(r_{B2}))\beta(s_2) \end{vmatrix} \\ &= C [\phi_{100}(r_{A1}) + \phi_{100}(r_{B1})][\phi_{100}(r_{A2}) + \phi_{100}(r_{B2})][\alpha(s_1)\beta(s_2) - \alpha(s_2)\beta(s_1)] \end{aligned}$$

$$\epsilon(\mathbf{R}) = \langle \phi | \hat{H}_0 | \phi \rangle$$

itt is minimumot ad a magtávolság függvényében.

8.1.8. A kémiai kötés és a vegyérték

A vegyérték az egyazon kötő molekulapályán helyet foglaló spinszingleket alkotó elektronpárnak felel meg.

Molekulaszerkezeti számolások: variációs módszer pl. Gauss-függvények lineáris kombinációjával.

8.1.9. A van der Waals-erők

$$V(R) = -\frac{A}{R^6}$$

(nemrelativisztikus van der Waals erő) ill.

$$V(R) = -\frac{B}{R^5}$$

(relativisztikus van der Waals erő, v.ö. Casimir-effektus)

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_A + \hat{H}_B + \hat{H}'$$

$$\hat{H}_A = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_1 - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{A1}}$$

$$\hat{H}_B = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_2 - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{B2}}$$

$$\hat{H}' = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{1}{R} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{A2}} - \frac{1}{r_{B1}} \right]$$

$$V(R) = \epsilon(R)$$

Az $\epsilon(R)$ alapállapotú energia meghatározását perturbációs számítással végezzük.

Nulladrend:

$$\phi_{\mathbf{n}}^{(0)} = \phi_{n_1 l_1 m_1}(r_{A1}) \phi_{n_2 l_2 m_2}(r_{B2})$$

$$\epsilon(R)_{\mathbf{n}}^{(0)} = E_{n_1 l_1 m_1} + E_{n_2 l_2 m_2}$$

$$\epsilon(R)_0^{(0)} = 2E_{100}$$

Ekkor

$$r_{A2} \approx r_{B1} \approx r_{12} \approx R \gg r_{A1}, r_{B2}$$

Ezért \hat{H}' -t sorbafejtjük \mathbf{r}_{A1} és \mathbf{r}_{B2} szerint:

$$\hat{H}' = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} \left[\mathbf{r}_{A1} \mathbf{r}_{B2} - \frac{3(\mathbf{r}_{A1} \mathbf{R})(\mathbf{r}_{B2} \mathbf{R})}{R^2} \right]$$

Ha \mathbf{R} z irányú:

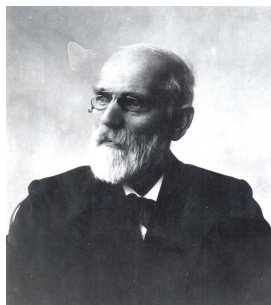
$$\hat{H}' = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} [x_{A1}x_{B2} + y_{A1}y_{B2} - z_{A1}z_{B2}]$$

Első rend:

$$\epsilon(R)^{(1)} = \langle \phi^{(0)} | \hat{H}' | \phi^{(0)} \rangle = 0$$

Másodrend:

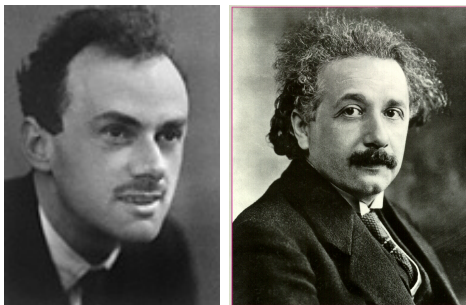
$$\epsilon(R)^{(2)} = \sum_n \frac{|H'_{0n}|^2}{\epsilon(R)_0^{(0)} - \epsilon(R)_n^{(0)}} = -\frac{A}{R^6}$$



44. ábra. Johannes Diderik van der Waals (1837-1923)

9. hét

9.1. Relativisztikus kvantummechanika. A Dirac-egyenlet



45. ábra. Paul Adrien Maurice Dirac (1902-1984) és Albert Einstein (1879-1955)

9.1.1. A speciális relativitáselmélet formalizmusa

Ha a K inerciarendszerben két esemény időkülönbsége t , helyvektoraik különbsége \mathbf{r} , a K' inerciarendszerben pedig ugyanezen két esemény időkülönbsége t' , helyvektoraik különbsége \mathbf{r}' , akkor

$$c^2 t^2 - \mathbf{r}^2 = c^2 t'^2 - \mathbf{r}'^2$$

Az $s^2 = c^2 t^2 - \mathbf{r}^2$ ívhossz invariáns mennyiség. A két inerciarendszerbeli tér- és időkoordinátákat a Lorentz-transzformáció kapcsolja össze (általános értelemben Lorentz-(vagy Poincaré)-transzformáció a koordináták minden olyan lineáris transzformációja, amely az ívhosszat megőrzi).

Metrikus tenzor:

$$s^2 = g_{ik} x^i x^k$$
$$x^0 = ct, \quad x^1 = x, \quad x^2 = y, \quad x^3 = z$$
$$g_{ik} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Lorentz-transzformáció:

$$x'^i = \Lambda^i_j x^j$$

Einstein-féle némaindex-konvenció: kétszer előforduló indexekre automatikusan összegzés értendő, azaz $A_i B^i \equiv \sum_{i=0}^3 A_i B^i$.

$$s^2 = g_{ik} x'^i x'^k = g_{ik} \Lambda_j^i \Lambda_l^k x^j x^l = g_{jl} x^j x^l$$

$$g_{jl} = g_{ik} \Lambda_j^i \Lambda_l^k$$

Mátrixjelöléssel:

$$\mathbf{g} = \mathbf{\Lambda}^T \mathbf{g} \mathbf{\Lambda}$$

Kontravariáns és kovariáns négyesvektorok:

Kontravariáns négyesvektor komponensei (index fent) úgy transzformálódnak (K-ról K'-re áttérve), mint az x^i téridő-komponensek:

$$A'^i = \frac{\partial x'^i}{\partial x^j} A^j = \Lambda_j^i A^j$$

Kovariáns négyesvektor komponensei (index lent) úgy transzformálódnak (K-ról K'-re áttérve), ahogy a skalárterek négyesgradiense:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x'^i} = \frac{\partial \Phi}{\partial x^j} \frac{\partial x^j}{\partial x'^i} = \frac{\partial \Phi}{\partial x^j} (\mathbf{\Lambda}^{-1})^j_i = (\mathbf{\Lambda}^{-1T})^j_i \frac{\partial \Phi}{\partial x^j} = (\mathbf{g} \mathbf{\Lambda} \mathbf{g}^{-1})^j_i \frac{\partial \Phi}{\partial x^j} = g_{ik} \Lambda_l^k g^{lj} \frac{\partial \Phi}{\partial x^j}$$

$$g^{ik} := (\mathbf{g}^{-1})^{ik}$$

$$A'_i = (\mathbf{g} \mathbf{\Lambda} \mathbf{g}^{-1})^j_i A_j$$

$$A_i = g_{ik} A^k$$

$$A^i = g^{ik} A_k$$

9.1.2. Az elektron relativisztikus kvantummechanikai leírása: Dirac-egyenlet

A relativitáselméletben az impulzus és az energia négyesvektort alkotnak:

$$p^0 = \frac{E}{c}, \quad p^1 = p_x, \quad p^2 = p_y, \quad p^3 = p_z$$

$$g_{ik} p^i p^k = \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2 = \mu^2 c^2$$

A kvantumelméletben a fizikai mennyiségeknek operátorok felelnek meg, koordinátareprezentációban

$$\hat{p}_k = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^k}$$

ill.

$$\hat{p}^k = g^{kj} i\hbar \frac{\partial}{\partial x^j}$$

Ezzel a Schrödinger-egyenlet relativisztikus megfelelője a Klein-Gordon- (vagy Schrödinger-Gordon-) egyenlet volna:

$$-\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} + \hbar^2 \Delta \Psi = \mu^2 c^2 \Psi$$

A Schrödinger-egyenlet szerint létezik megmaradó valószínűsűrsűrűség ($|\Psi|^2$). A Klein-Gordon-egyenlet esetén is van megmaradó mennyiség, de az nem pozitív definit, így nem értelmezhető valószínűsűrsűrűségként:

$$\rho = \frac{i\hbar}{2\mu c^2} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right)$$

A probléma oka, hogy az egyenlet másodrendű (míg a Schrödinger-egyenlet az idő szerint csak első deriváltat tartalmaz).

További nehézségek: a spin relativisztikus értelmezése problematikus, hibás finomszerkezet adódik a hidrogén spektrumára.

Megoldás: tér és idő szerinti első deriváltakat tartalmazó egyenlet, amelynek Hamilton-operátora a Klein-Gordon-egyenletbeli operátor négyzetgyöke:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

$$\hat{H} = \sqrt{\mu^2 c^4 - c^2 \hbar^2 \Delta}$$

Ahhoz, hogy a gyökvonás eredménye első deriváltak lineáris kombinációja legyen, négykomponensű hullámfüggvény bevezetése szükséges. Ekkor ugyanis \hat{H} mátrix a komponensekre nézve, a gyökjel alatt szintén operátorok mátrixa szerepel, ekkor pedig a gyökvonás végrehajtható.

2×2 -es mátrixokra példa:

$$\sqrt{(a^2 + b^2 + c^2) \mathbf{1}} = a\sigma_x + b\sigma_y + c\sigma_z$$

ahol σ_x , σ_y , σ_z a Pauli-féle spinmátrixok:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Antikommutátor:

$$\{\sigma_j, \sigma_k\} := \sigma_j \sigma_k + \sigma_k \sigma_j = 2\delta_{jk} \mathbf{1}$$

$$\hat{H} = \alpha^0 \mu c^2 + \sum_{j=1}^3 \alpha^j \left(-i\hbar c \frac{\partial}{\partial x^j} \right)$$

Itt $\alpha^0, \alpha^1, \alpha^2, \alpha^3$ 4×4 -es mátrixok, melyekre teljesül, hogy

$$\{\alpha^j, \alpha^k\} = 2\delta_{jk} \mathbf{1}$$

Ilyen tulajdonságú hermitikus mátrixok csakugyan léteznek, pl.

$$\alpha^0 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & 0 \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

$$\alpha^1 = \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & -\sigma_x \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{array} \right)$$

$$\alpha^2 = \begin{pmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & -\sigma_y \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \end{array} \right)$$

$$\alpha^3 = \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & -\sigma_z \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right)$$

Tetszőleges 4×4 -es unitér \mathbf{U} mátrixszal végzett hasonlósági transzformáció az antikommutátort megőrzi, ezért

$$\alpha'^j = \mathbf{U} \alpha^j \mathbf{U}^\dagger$$

is használható a fenti α^j -k helyett.

Dirac-egyenlet:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[\alpha^0 \mu c^2 + \sum_{j=1}^3 \alpha^j \left(-i\hbar c \frac{\partial}{\partial x^j} \right) \right] \Psi$$

Másképpen:

$$i\hbar\alpha^0\frac{\partial\Psi}{\partial ct} + i\hbar\sum_{j=1}^3\alpha^0\alpha^j\frac{\partial\Psi}{\partial x^j} = \mu c\Psi$$

Legyen

$$\gamma^0 = \alpha^0 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & 0 \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

$$\gamma^1 = \alpha^0\alpha^1 = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

$$\gamma^2 = \alpha^0\alpha^2 = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ \hline 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

$$\gamma^3 = \alpha^0\alpha^3 = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

Ekkor a Dirac-egyenlet alakja

$$i\hbar\gamma^j\frac{\partial\Psi}{\partial x^j} = \mu c\Psi$$

vagyis

$$\gamma^j\hat{p}_j\Psi = \mu c\Psi$$

ill.

$$\gamma_j\hat{p}^j\Psi = \mu c\Psi$$

ahol

$$\gamma_j = g_{jk}\gamma^k$$

Mindezekben a képletekben

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1(t, x, y, z) \\ \Psi_2(t, x, y, z) \\ \Psi_3(t, x, y, z) \\ \Psi_4(t, x, y, z) \end{pmatrix}$$

Vigyázat, Ψ nem négyesvektor (másképp transzformálódik)!

A Dirac-féle gamma-mátrixok tulajdonságai:

$$\{\gamma^j, \gamma^k\} = 2g^{jk} \mathbf{1}$$

A használt metrika-konvenció mellett γ^0 hermitikus (önadjungált), míg $\gamma^1, \gamma^2, \gamma^3$ antihermitikus (adjungáláskor előjelet vált). (megjegyzés: \hat{H} hermitikus)

Tetszőleges 4×4 -es unitér \mathbf{U} mátrixszal végzett hasonlósági transzformáció az antikommutátort megőrzi, ezért

$$\gamma'^j = \mathbf{U} \gamma^j \mathbf{U}^\dagger$$

is használható a fenti γ^j -k helyett.

Az állapotvektor adjungáltja:

$$\Psi^\dagger = (\Psi_1^*(t, x, y, z) \quad \Psi_2^*(t, x, y, z) \quad \Psi_3^*(t, x, y, z) \quad \Psi_4^*(t, x, y, z))$$

Az állapotvektor Dirac-konjugáltja:

$$\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \gamma^0 = (\Psi_3^*(t, x, y, z) \quad \Psi_4^*(t, x, y, z) \quad \Psi_1^*(t, x, y, z) \quad \Psi_2^*(t, x, y, z))$$

$$i\hbar \gamma^j \frac{\partial \Psi}{\partial x^j} = \mu c \Psi$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial x^j} \gamma^{j\dagger} = \mu c \Psi^\dagger$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial x^j} \gamma^{j\dagger} \gamma^0 = \mu c \Psi^\dagger \gamma^0$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial x^j} \gamma^0 \gamma^j = \mu c \Psi^\dagger \gamma^0$$

$$-i\hbar \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x^j} \gamma^j = \mu c \bar{\Psi}$$

$$\frac{\partial}{\partial x^j} (\bar{\Psi} \gamma^j \Psi) = 0$$

Kontinuitási egyenlet (megmaradási tétel következik belőle):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$$

Valószínűségi sűrűség (pozitív definit):

$$\rho = \bar{\Psi}\gamma^0\Psi = \Psi^\dagger\gamma^0\Psi = \Psi^\dagger\Psi = \sum_{n=1}^4 |\Psi_n|^2$$

Valószínűségi áram:

$$j^k = \bar{\Psi}\gamma^k\Psi \quad k = 1, 2, 3$$

9.1.3. Szabad részecske mozgása a Dirac-egyenlet alapján

z irányban mozgó elektronra:

$$\Psi = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} \exp\left(i\frac{p_z z}{\hbar} - i\frac{Et}{\hbar}\right)$$

Itt u_j -k konstansok. A Dirac-egyenlet ekkor:

$$\left(\frac{E}{c}\gamma^0 - p_z\gamma^3\right) \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = \mu c \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}$$

vagy nullára redukálva:

$$\left(\frac{E}{c}\gamma^0 - p_z\gamma^3 - \mu c\mathbf{1}\right) \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = 0$$

$$\left(\begin{array}{cc|cc} -\mu c & 0 & \frac{E}{c} - p_z & 0 \\ 0 & -\mu c & 0 & \frac{E}{c} + p_z \\ \hline \frac{E}{c} + p_z & 0 & -\mu c & 0 \\ 0 & \frac{E}{c} - p_z & 0 & -\mu c \end{array}\right) \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = 0$$

Átrendezve:

$$\left(\begin{array}{cc|cc} -\mu c & \frac{E}{c} - p_z & 0 & 0 \\ \frac{E}{c} + p_z & -\mu c & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & -\mu c & \frac{E}{c} + p_z \\ 0 & 0 & \frac{E}{c} - p_z & -\mu c \end{array} \right) \begin{pmatrix} u_1 \\ u_3 \\ u_2 \\ u_4 \end{pmatrix} = 0$$

A megoldhatóság feltétele a mátrix determinánsának eltűnése:

$$\left| \begin{array}{cc|cc} -\mu c & \frac{E}{c} - p_z & 0 & 0 \\ \frac{E}{c} + p_z & -\mu c & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & -\mu c & \frac{E}{c} + p_z \\ 0 & 0 & \frac{E}{c} - p_z & -\mu c \end{array} \right| = \left(\mu^2 c^2 - \frac{E^2}{c^2} + p_z^2 \right)^2 = 0$$

Ez tehát éppen a relativisztikus

$$E^2 - p_z^2 c^2 = \mu^2 c^4$$

összefüggés fennállásakor teljesül.

Két lineárisan független megoldás létezik:

$$u_1^{(1)} = \frac{\frac{E}{c} - p_z}{\mu c} \quad u_3^{(1)} = 1 \quad u_2^{(1)} = 0 \quad u_4^{(1)} = 0$$

azaz

$$u^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{\frac{E}{c} - p_z}{\mu c} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

és

$$u_1^{(2)} = 0 \quad u_3^{(2)} = 0 \quad u_2^{(2)} = 1 \quad u_4^{(2)} = \frac{\frac{E}{c} - p_z}{\mu c}$$

azaz

$$u^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{\frac{E}{c} - p_z}{\mu c} \end{pmatrix}$$

Kis sebességek esetén $\frac{\frac{E}{c} - p_z}{\mu c} = 1 - \frac{v}{c}$.

Negatív energiás megoldások \Rightarrow pozitron (betöltött negatív energiájú állapotok terében „lyuk”, azaz üres állapot)

9.1.4. A Dirac-egyenlet szimmetriái

Tetszőleges kis téridőbeli forgatás (Lorentz-transzformáció):

$$x'^i = \Lambda^i_j x^j$$

$$\Lambda = \mathbf{1} + \boldsymbol{\lambda}$$

$$x'^i = x^i + \lambda^i_j x^j$$

$$\mathbf{g} = \Lambda^T \mathbf{g} \Lambda \Rightarrow \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{g} + \mathbf{g} \boldsymbol{\lambda} = 0 \Rightarrow (\mathbf{g} \boldsymbol{\lambda})^T = -\mathbf{g} \boldsymbol{\lambda}$$

Ekkor a négykomponensű Ψ állapotvektor is transzformálódik:

$$\Psi' = \Psi + \mathbf{W} \Psi$$

Itt \mathbf{W} egyelőre ismeretlen, infinitezimálisan kis komponensekkel rendelkező 4×4 -es mátrix. A kovariancia követelményéből határozzuk meg:

$$i\hbar \gamma^j \frac{\partial \Psi'}{\partial x'^j} = \mu c \Psi'$$

$$i\hbar \gamma^j \left(\frac{\partial}{\partial x^j} - \frac{\partial}{\partial x^k} \lambda^k_j \right) (\mathbf{1} + \mathbf{W}) \Psi = \mu c (\mathbf{1} + \mathbf{W}) \Psi$$

$$(\mathbf{1} - \mathbf{W}) i\hbar (\gamma^j - \lambda^j_k \gamma^k) \frac{\partial}{\partial x^j} (\mathbf{1} + \mathbf{W}) \Psi = \mu c \Psi$$

Ebből

$$\gamma^j \mathbf{W} - \mathbf{W} \gamma^j = \lambda^j_k \gamma^k$$

esetén következik, hogy

$$i\hbar \gamma^j \frac{\partial \Psi}{\partial x^j} = \mu c \Psi$$

$$\mathbf{W} = \frac{1}{4} \lambda_{rs} \gamma^r \gamma^s \equiv \frac{1}{4} g_{rl} \lambda^l_s \gamma^r \gamma^s$$

$$\Psi' = \Psi + \frac{1}{4} \lambda_{rs} \gamma^r \gamma^s \Psi$$

$$\bar{\Psi}' = \bar{\Psi} + \Psi^\dagger \frac{1}{4} \lambda_{rs} \gamma^{s\dagger} \gamma^{r\dagger} \gamma^0 = \bar{\Psi} + \Psi^\dagger \gamma^0 \frac{1}{4} \lambda_{rs} \gamma^s \gamma^r = \bar{\Psi} - \bar{\Psi} \frac{1}{4} \lambda_{rs} \gamma^r \gamma^s = \bar{\Psi} - \bar{\Psi} \mathbf{W}$$

$$\bar{\Psi}' \gamma^j \Psi' = \bar{\Psi} (\mathbf{1} - \mathbf{W}) \gamma^j (\mathbf{1} + \mathbf{W}) \Psi = \bar{\Psi} \gamma^j \Psi + \bar{\Psi} (\gamma^j \mathbf{W} - \mathbf{W} \gamma^j) \Psi$$

$$\bar{\Psi}' \gamma^j \Psi' = \bar{\Psi} \gamma^j \Psi + \lambda^j_k \bar{\Psi} \gamma^k \Psi$$

$\bar{\Psi}\Psi$ skalár, $\bar{\Psi}\gamma^j\gamma^k\Psi$ kétindexes tenzor.

$$\gamma^5 = \gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$$

$\bar{\Psi}\gamma^5\Psi$ pszeudoskalár, $\bar{\Psi}\gamma^5\gamma^j\Psi$ pszeudovektor. Tértükrözési szimmetria:

$$x'^0 = x^0 \quad x'^1 = -x^1 \quad x'^2 = -x^2 \quad x'^3 = -x^3$$

$$i\hbar\gamma^j\frac{\partial\Psi'}{\partial x'^j} = \mu c\Psi'$$

$$\Psi' = \gamma^0\Psi$$

9.1.5. Az elektron saját impulzusmomentuma (spinje)

A hullámfüggvény megváltozás infinitezimális elforgatáskor:

$$\Psi'(x') - \Psi(x) = \frac{i}{\hbar} \left(\hat{L}_z + \hat{S}_z \right) \delta\vartheta\Psi(x')$$

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\gamma^1\gamma^2$$

Általában

$$\hat{S}_j = \frac{\hbar}{2}\epsilon_{jkl}\gamma^k\gamma^l$$

9.1.6. Töltött részecske elektromágneses térben

$$p_j \rightarrow p_j - q_e A_j$$

$$i\hbar\gamma^j \left(\frac{\partial}{\partial x^j} + \frac{iq_e}{\hbar} A_j \right) \Psi = \mu c\Psi$$

9.1.7. Az elektron mágneses nyomatéka

9.1.8. A hidrogénatom energia-sajátértékei a Dirac-egyenlet alapján

9.1.9. Spin-pálya kölcsönhatás

10. hét

10.1. Az elektromágneses tér kvantumelmélete

10.1.1. A sugárzási tér alapegyenletei kanonikus alakban

10.1.2. A sugárzási tér kvantálása

10.1.3. Az elektromágneses sugárzási tér vákuum-ingadozása

10.1.4. Az elektromágneses sugárzás kölcsönhatása atomokkal

10.1.5. A színekvonalak természetes szélessége

11. hét

11.1. Pályaintegrálok

11.1.1. A legkisebb hatás elve a klasszikus mechanikában

11.1.2. Átmeneti valószínűségi amplitudók

11.1.3. Pályaintegrál

11.1.4. Klasszikus határeset nyeregpon-t-módszerrel

11.1.5. Pályaintegrálok a kvantumtérelméletben

12. hét

12.1. A mérés szerepe a kvantummechanikában. A koppenhágai értelmezés. Kvantumparadoxonok. Dekoherencia.

12.1.1. A kvantummechanikai mérés posztulátumai és a koppenhágai értelmezés

12.1.2. Leírható-e kvantummechanikailag a mérési folyamat?

12.1.3. Az Einstein-Podolsky-Rosen-paradoxon

12.1.4. A Bell-egyenlőtlenség

12.1.5. Schrödinger macskája: érvényes-e a szuperpozíció elve makroszkopikus rendszerekre?

12.1.6. Részrendszerek és a sűrűségmátrix

12.1.7. A Caldeira-Leggett-modell

12.1.8. Dekoherencia

13. hét

13.1. A kvantummechanika modern alkalmazási területei

lézerek, kvantumoptika, szilárdtestek sáv szerkezete, kvantumfolyadékok

13.1.1.

13.1.2.

13.1.3.

13.1.4.

13.1.5.

13.1.6.

13.1.7.

13.1.8.