

BEVEZETÉS**Klasszikus fizikai kiegészítő**

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

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

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

Ha a vizsgált fizikai rendszer "lineáris", akkor különböző ω (kör)frekvenciájú síkhullámok lineáris kombinációja szintén megoldása a hullámegyenletnek. Ezt a megoldást szemléletesen hullámcsomagnak nevezzük akkor, ha az egy térben lokalizált (véges kiterjedésű) (hullám)jelenséget ír le. Az összetevő "k" hullámszámú síkhullámok amplitúdóinak összességét a hullámcsomag "c(k)" spektrumának nevezzük. A matematikai nehézségek elkerülése végett egy olyan hullámcsomagot vizsgálunk meg, amelynek a spektruma "négyzög alakú". Ez azt jelenti, hogy egy k_0 hullámszám $\pm \Delta k$ környezetében lévő minden síkhullámot egyforma "c₀" amplitúdóval összeadunk. Ez a hullámcsomag a specialitása ellenére már rendelkezik azokkal az általános tulajdonságokkal, amelyekre most rá szeretnénk mutatni. Ha a spektrum elegendően keskeny, akkor az $\omega(k)$ függés a spektrum $k_0 \pm \Delta k$ tartományában lineárisnak tekinthető. Ezzel a közelítéssel a hullámcsomag térbeli alakja egyszerű integrálással megkapható. Az eredményt megvizsgálva azt láthatjuk, hogy minél jobban lokalizált egy hullámcsomag, annál szélesebb spektrummal rendelkezik és viszont. Ez általában (azaz tetszőleges alakú de véges szélességű) spektrum esetén is igaz! A hullámcsomag, mint egységes objektum haladási sebessége az ún. csoportsebesség. Ezt legtöbbször a hullámcsomag egy pontjának (pl. a maximumának) a haladási sebességét jelenti.

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

OROSZ L. Kvantummechanika 3. oldal

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

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

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

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

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

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

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

OROSZ L. Kvantummechanika 4. oldal.

1. KVANTUMMECHANIKA

Bevezető (Történeti áttekintés)

A hőmérsékleti sugárzás jelenségét a hétköznapiakban is mindenki tapasztalhatja. Minden T hőmérsékletű test elektromágneses hullámok formájában energiát sugároz. Ennek oka a testet felépítő

atomokban lévő elektromos töltések (gyorsuló, pl. rezgő) mozgása. Abszolút fekete testnek azt a testet nevezzük, amely a ráeső elektromágneses sugárzást teljes egészében elnyeli. Ez a "test" egy tetszőleges anyagi minőségű szilárd anyagba vájt, tetszőleges alakú üreg elegendően kicsiny kivezető nyílásával modellezhető. Ugyanis a nyíláson bejutó fény (elektromágneses sugárzás) elvileg végtelen sok reflexió után érné el ismét a lyuk kivezető nyílását. Ekkorra azonban (az egyes reflexióknál elnyelődött energiák következtében) az intenzitása gyakorlatilag a zérusra csökken. Így a nyíláson belépett fény teljesen elnyelődött. Pontosan ez a fekete test definíciója.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Ő volt Albert Einstein!

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

OROSZ L. Kvantummechanika 6. oldal

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

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

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

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

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

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

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

megkaphatók.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

OROSZ L. Kvantummechanika 7. oldal.

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

OROSZ L. Kvantummechanika 8. oldal.

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

Később így emlékezett vissza azokra az időkre:

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

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

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

L. de-Broglie ezt a hullámot igen találóan "vezérhullám"-nak nevezte el és meglehetősen óvatossággal fogalmazott:

„Az anyagi részecskék lehetséges megnyilvánulásainak térbeli eloszlását ekkor a részecskékhez társuló hullám terjedése kell, hogy leírja...”

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

OROSZ L. Kvantummechanika 9. oldal.

1.1. Hullámmechanika

1.1.1 A Schrödinger egyenlet és a hullámfüggvény

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Az időfüggetlen Schrödinger egyenletben szereplő operátort Hamilton operátornak nevezik.

A parciális differenciálegyenletek megoldása általában igen bonyolult matematikai feladat.

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

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

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

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

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

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

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

mindig sor kerül, valahányszor megoldjuk a Schrödinger egyenletet. A fontossága miatt célszerű ismét összefoglalni:

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

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

OROSZ L. Kvantummechanika 12. oldal.

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

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

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

OROSZ L. Kvantummechanika 13. oldal.

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

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

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

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

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

Max Born (1882-1970) széleskörű matematikai ismeretekkel rendelkező fizikus volt. A „matematikusok Mekkájában”, Göttingenben olyan nagyhírű „proféták” előadásait hallgatta, mint: Felix Klein, David Hilbert és Hermann Minkowski. A doktori munkáját a neves elméleti csillagász K. Schwarzschild vezetése alatt írta. Valószínűleg ennek a matematikai tudásának köszönhető, hogy a „hullámfüggvény valószínűségi értelmezése” éppen az ő ötlete volt.

Mindezekkel kapcsolatban a következőket írja:

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

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

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

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

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

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

OROSZ L. Kvantummechanika 14. oldal.

1.1.2. A hullámfüggvény matematikai tulajdonságai

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

Az időfüggetlen Schrödinger egyenlet egy ún. "sajátérték egyenlet". A Hamilton operátor ugyanis a ψ állapotfüggvényt önmaga állandósorozásába, azaz $E \cdot \psi$ -be kell, hogy transzformálja. A lineáris (vektor)

tereknél találkozhattunk már hasonló feladattal. Az ott használatos elnevezések analógiájára a ψ állapotfüggvényt "sajátfüggvénynek", az E-t "sajátértéknek" hívjuk.

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

A megoldás menete a következő.

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

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

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

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

Ennek legegyszerűbb esetét fogjuk tárgyalni..

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

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

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

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

OROSZ L. Kvantummechanika 15. oldal.

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

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

Gyökeresen új szemléletet kell kialakítanunk magunkban!

EZ PEDIG A KVANTUMMECHANIKA SZEMLÉLETE.

OROSZ L. Kvantummechanika 16. oldal.

1.1.3. Egyszerű példák kötött állapotokra

1.1.3.1. Az egydimenziós potenciálvölgy.

Az ábrából látható, hogy kötött állapotról akkor beszélhetünk, ha a részecske energiája pozitív, és nagysága kisebb, mint a potenciálvölgy (potenciálgödör) magassága. A klasszikus mozgás tartománya az L

hosszúságú szakasz. Az általános ismereteink alapján fel tudjuk rajzolni a hullámfüggvények várható alakját. Pontos matematikai kifejezésekhez a Schrödinger egyenlet megoldásával juthatunk.

Ennek menete a következő:

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

Jelen esetben a regularitási feltételek a következők:

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

Ezeknek a feltételeknek csak bizonyos E_1, E_2, E_3, \dots stb.... energiákhoz tartozó hullámfüggvények tesznek eleget.

Ezek elemi matematikai (grafikus) eljárással egyszerűen meghatározhatók.

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

OROSZ L. Kvantummechanika 17. oldal.

1.1.3.2. A potenciáldoboz

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

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

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

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

OROSZ L. Kvantummechanika 18. oldal.

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

Az állapotfüggvény (Ψ hullámfüggvény) ismeretében a részecske megtalálási valószínűsége is meghatározható. Eredményül azt kapjuk, hogy a kvantummechanikai valószínűsége a klasszikus körül

oszcillál még hozzá annál nagyobb térfrekvenciával, minél nagyobb a részecske energiája. Ez az észrevételünk általában is igaznak fog bizonyulni.

Az egydimenziós potenciáldobozban mozgó részecske klasszikus tárgyalásban két fal között pattogó tömegpontnak felel meg. Az imént kapott kvantummechanikai eredmények első pillantásra meglehetősen idegenek a klasszikus szemléletünk számára. A makroszkopikus világban a newtoni fizika eredményeit tapasztaljuk, ezért azt várjuk, hogy a kvantummechanika makroszkopikus határesetben vissza kell, hogy adja a klasszikus mechanika eredményeit. Érdekes tehát ezt megvizsgálni ebben az igen egyszerű és szemléletes esetben. A klasszikus határeset a mikroszkopikus energiaszintekhez képest nagy(?) energiát jelent. Ez azt jelenti, hogy a klasszikus mechanikával tárgyalható részecske energiája sokkal nagyobb, mint az alapállapot energiája (az első energiaszint!). Azaz az „ n ” kvantumszám sokkal nagyobb, mint egy.

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

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

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

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

OROSZ L. Kvantummechanika 19. oldal.

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

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

OROSZ L. Kvantummechanika 20. oldal

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

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

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

A szimmetria tulajdonságok matematikai tárgyalása az ún. „csoportelmélet” segítségével történik. A csoportelmélet alapjait az 1832-ben, a 21 éves korában, párbajban megölt zseniális francia matematikus Evariste Galois [ejtése: GALOÁ] tette le. A csoportelméletet E. Galois az ötöd- és magasabbfokú egyenletek algebrai

megoldhatatlanságának a problémája vizsgálatához teremtette meg, amely azután hamarosan nélkülözhetetlenné vált a matematika egész területén és a XX.századi modern fizikában is. A wigner felismerés a csoportelmélet továbbfejlődésének az ösztönzőjévé vált. Mára már egy igen hatékony matematikai apparátust sikerült kiépíteni.

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

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

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

Tekintsük a háromdimenziós, kocka alakú potenciáldobozban lévő elektron (részecske) esetét.

A rendszer szimmetriája azt jelenti, hogy ha egy geometriai transzformációval (forgatás, tükrözés) a kockát önmagába transzformáljuk, akkor ez semmiféle fizikai változást nem eredményez. Meg fogjuk nézni, hogy mi történik egy állapotfüggvénnyel a szimmetriatranszformációk során.

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

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

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

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

OROSZ L. Kvantummechanika 21.oldal

1.1.3.3. A harmonikus lineáris oszcillátor

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

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

OROSZ L. Kvantummechanika 22.oldal

Az egyenlet megoldása pusztán eddigi matematikai ismereteink alapján igen nehéz lenne. Támaszkodhatunk azonban arra, amit a Schrödinger egyenlet általános matematikai vizsgálata során tapasztaltunk. Azaz tudjuk, hogy kötött állapot lévén az energiaszintek kvantáltak, és az állapotfüggvények "egypúpú", "kétpúpú", "hárompúpú", stb.. (valós)függvények lesznek. Mivel a potenciális energia szimmetrikus (páros függvény), könnyű belátni, hogy az állapotfüggvények páros és páratlan függvények lesznek. A

legalacsonyabb energiaszinthez (az alapállapothoz) tartozó ψ függvény tehát egy "egypúpú" páros függvény kell, hogy legyen. Keressük ezt egy x^2 -től függő exponenciális függvény alakjában (ún. Gauss függvény). Közvetlen behelyettesítéssel igazolhatjuk, hogy a feltételezésünk helyes volt.

OROSZ L. Kvantummechanika 23. oldal

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

OROSZ L. Kvantummechanika 24. oldal

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

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

A polinom módszer főbb lépései tehát a következők:

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

OROSZ L. Kvantummechanika 25. oldal

A harmonikus lineáris oszcillátorra kapott megoldások jellegzetességei tehát a következők.

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

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

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

A kvantummechanikai megtalálási valószínűség sűrűség a klasszikus eredmény körül ingadozik.

1.1.4. Nem kötött állapotok tárgyalása

1.1.4.1. A valószínűségi áramsűrűség

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

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

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

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

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

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

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

Az eredmények szemléletesen általánosíthatók háromdimenziós esetre.

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

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

1.1.4.2. Áthaladás potenciálgáton (közelítő számítás)

A valószínűségi áramsűrűség bevezetése lehetővé teszi annak kiszámítását, hogy egy (az „x” tengely mentén mozgó) „ $E < V_0$ ” kinetikus energiájú részecske mekkora valószínűséggel jut át egy „ V_0 ” magasságú és „ $L = x_2 - x_1$ ” szélességű ún. "négyzetleges potenciálgáton". A feladat értelemszerűen egydimenziós. Az átjutás valószínűségét T "transzmissziós tényezőnek" nevezzük. Ez természetesen egy 0 és 1 közé eső valószínűség. Definíciójához egyszerű fizikai megfontolások alapján jutunk.

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

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

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

OROSZ L. Kvantummechanika 29. oldal

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

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

OROSZ L. Kvantummechanika 30. oldal

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

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

OROSZ L. Kvantummechanika 31. oldal

1.1.4.3. Áthaladás potenciálgáton, potenciálvölgyön

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

A hullámfüggvény kiszámítására a már ismert módszert használjuk. Azaz először meghatározzuk a Schrödinger egyenlet általános, matematikai megoldásait, majd ezekből (a regularitási feltételek segítségével)

kiválasztjuk a fizikailag értelmezhető megoldásokat. A véges potenciálugrások (lépcsők) a teret (az „ x ” tengelyt) három részre bontják. Az egyes tartományokon belül a Schrödinger egyenlet általános megoldásai egyszerűen megkaphatók. Mivel most nem kötött állapotról van szó, ezért a végtelen távoli pontokban a J valószínűségi áramsűrűségnek kell végesnek lenni (a négyzetes integrálhatóságot csak kötött állapotban kell teljesítenie az állapotfüggvénynek!). A regularitási feltételeket a potenciálugrások helyén (x_1 és x_2 pontokban) is teljesíteni kell, azaz a ψ -nek folytonosan deriválhatónak kell lennie. A Gamow-féle közelítésben csak a ψ folytonosságát követeltük meg!

A transzmissziós tényezőt a már definiált módon határozzuk meg.

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

1.) Ha a beeső részecske energiája a potenciálgát magasságánál kisebb ($E < V_0$), akkor a részecske alagút effektus révén véges valószínűséggel átmehet a gáton. (Klasszikus esetben biztosan nem jut át!)

2.) Ha a beeső részecske energiája a potenciálgát magasságánál nagyobb ($E > V_0$), akkor a részecske csak bizonyos E_i energiákon képes biztosan áthaladni a gáton (Klasszikus esetben minden ilyen energián átjut!) A $T(E_i) = 1$ egyenlet megoldása egyszerű, és az eredmény igen szemléltetésen értelmezhető.

OROSZ L. Kvantummechanika 32. oldal

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

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

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

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

OROSZ L. Kvantummechanika 33. oldal

1.2. A kvantummechanika axiomatikus felépítése

A kvantummechanika a fizika egyik axiomatikus felépített rendszerének tekinthető. Azaz ismeretesek azok az alaptörvények (görögül axiómák, latinul posztulátumok), amelyeket közvetlen bizonyítás nélkül el kell fogadnunk és amelyekből minden más állítás levezethető. Az axiómarendszer helyességét az igazolja, hogy az eddig tapasztalt valamennyi jelenség a segítségével értelmezhető, sőt az általa előre megjósolt jelenségeket a mérések utóbb igazolják.

A kvantummechanika axiómáit mi öt db törvénybe foglaljuk össze. Ne zavarjon meg senkit az, hogy az irodalomban máshol esetleg ezekkel a törvényekkel részletesebb bontásban találkozunk. A lényeg az, hogy ez nem érinti! Ahol az lehetséges volt, ott mi a "lényegileg összetartozó" állításokat egy axiómába foglaltuk össze. Ezen elvek szerint a kvantummechanika öt axiómája két csoportba választható szét. Az első két axióma rögzíti azokat a matematikai fogalmakat (eszközrendszert), amelyeket a fizikai fogalmainkhoz rendelünk. A maradék három axióma pedig lényegében a mérhető fizikai mennyiségekre vonatkozó állításokat fogalmazza meg.

Először az lesz a feladatunk, hogy az axiómákat "kitaláljuk". Ez úgy történik, hogy az egyedi mérési tapasztalatainkat általánosítjuk. Ez a kvantummechanika kialakulása során is így történt. Sok hibás általánosítás csapdán és zsákutcáin átvergődve jutottak el a fizikusok a mai "letisztult" állapotig. Az, hogy ez mennyire "tisztá és érthető" illetve, hogy vajon ez-e a "végső" helyzet, az más kérdés. A válasz valószínűen mindkettőre nemleges. De ez már kívül esik a vizsgálódásunk területén.

1.2.1. A kvantummechanika matematikai eszközei

Először csak (az eddigieknek megfelelően) egyetlen részecske mikrofizikai tulajdonságainak a meghatározásával foglalkozunk. Ekkor a környezetnek a részecskére gyakorolt hatását az (általánosított) $V(\vec{r}, t)$ potenciális energia függvény fejezi ki. (Az általánosítás az időfüggésben van!) A "több részecskés rendszerek" vizsgálatára később kerül majd sor, amikor már kellő jártasságot szereztünk az "egyszerűbb" jelenségek megértésében.

A Schrödinger egyenletek tárgyalásánál már bevezettük az ún. Hamilton operátort. Eddig ez azt a célt szolgálta csupán, hogy egyenleteink formálisan egyszerűbbnek tűnjenek. Általában a matematikában az ilyenfajta egyszerűsítés valójában valamilyen lényeges struktúra felismerését jelenti. Ez pedig már nem üres formai játék, mert magában rejtheti az általánosítás lehetőségét. Mint kiderült most is erről van szó. A $\hat{H}\psi = E \cdot \psi$ időfüggetlen Schrödinger egyenlet formailag egy sajátérték egyenlet, amely, a mérési tapasztalatok szerint, az elektron (vagy valamilyen más részecske) energiájának a meghatározására szolgál. Az „ E ” energiát az egyenlet sajátértéke adja meg. Ezen (egyedi tapasztalatot kifejező) egyenlet általánosításával juthatunk el az axiómák egy részéhez. Azaz tételezzük fel, nem csak az energia, hanem minden más esetben is hasonló matematikai számításokkal kaphatjuk meg egy keresett fizikai mennyiség számértékét! Kiindulásul megfogalmazhatjuk tehát a **harmadik axiómát**. Eszerint:

"Mindен fizikai mennyiség lehetséges mérhető értékeit, az illető fizikai mennyiségre jellemző sajátérték-egyenlet sajátértékei adják meg."

Ezekben az egyenletekben operátorok, sajátértékek és sajátfüggvények szerepelnek. Meg kell tehát mondani, hogy milyen operátorokat kell használnunk, illetve azt, hogy mit jelentenek a sajátfüggvények? Ez irányú tapasztalatainkat az első két axiómában foglaljuk össze.

Kimondhatjuk tehát, a **második axióma** később még kibővítésre kerülő egyszerű változatát, azaz, hogy:

"A fizikai mennyiségekhez (jelen esetben mechanikáról lévén szó ezeket dinamikai változóknak fogjuk nevezni) operátorokat kell rendelni."

Eddig annyit tudunk, hogy az összenergiához a Hamilton operátor tartozik. A többi operátor-hozzárendelést ebből fogjuk kitalálni és azt ugyancsak a második axiómába fogjuk rögzíteni. Induljunk ki abból, hogy a dinamikai változók közötti kapcsolatokat a klasszikus mechanikából már ismerjük! Tételezzük fel, hogy ezek a kvantummechanikában is érvényben maradnak! Ezek szerint egy tömegpont (részecske) minden dinamikai tulajdonsága megmondható, ha a helye (\vec{r}) és az impulzusa (\vec{p}) ismeretes. Tehát minden dinamikai változó az \vec{r} vektor és a \vec{p} vektor függvényeként definiálható. A klasszikus mechanikában a W_k kinetikus és a V potenciális energia összegét a $H(\vec{r}, \vec{p}) \equiv W_k(\vec{p}) + V(\vec{r})$ Hamilton függvénynek nevezik. A feladatunk tehát az, hogy kitaláljuk azokat az operátorokat, amelyeket a helykoordinátákhoz (x, y, z) és az impulzus koordinátákhoz (p_x, p_y, p_z) kell rendelnünk úgy, hogy azok a jól ismert \hat{H} Hamilton operátort adják vissza.

A $H(p_x, p_y, p_z, x, y, z)$ Hamilton függvény és a Schrödinger egyenletnél bevezetett \hat{H} operátor összehasonlításával egy kézenfekvő lehetőség kínálkozik a hely(koordináta) és az impulzus(koordináta) operátorok megkonstruálására. Mi a Schrödinger által javasolt megoldást fogjuk használni. Eszerint a hely(koordináta)-hoz rendelt operátornak a "helykoordinátával való szorzást" feleltetjük meg és az

impulzus(koordináta)-hoz rendelt operátor a megfelelő "helykoordináta szerinti deriválás" matematikai műveletével hozható kapcsolatba.

Azaz $\hat{x} \equiv x$ · valamint $\hat{p}_x \equiv \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial x}$ és a többi komponens is esetén hasonló módon járunk el.

Az (x, y, z, p_x, p_y, p_z) dinamikai alaplennységekhez rendelt operátorok ismeretében egy tetszőleges $F(\vec{p}, \vec{r})$ dinamikai változóhoz rendelt \hat{F} operátor a Hamilton operátor mintájára kapható meg.

Ezek szerint, egy tetszőleges F dinamikai változóhoz oly módon rendelünk operátort (2.axióma!), hogy előbb felírjuk a dinamikai változó $F(p_x, p_y, p_z, x, y, z)$ klasszikus definícióját, majd ezután a koordináta és impulzuskomponensek helyébe beírjuk a Schrödinger féle operátorokat, azaz $\hat{F} \equiv F(\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z, \hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$.

Az eddigiek alapján már megfogalmazhatjuk azt az általános matematikai módszert, amelyet mindig alkalmazunk majd valamely ismert dinamikai változó kvantummechanikai tárgyalása során. Először felírjuk az illető dinamikai változó klasszikus mechanikai definícióját ($F(\vec{p}, \vec{r})$). Utána a 2.axióma szerint megkonstruáljuk a dinamikai változóhoz rendelt operátort (\hat{F}). Majd ezután felírjuk a sajátérték egyenletet és megoldjuk ($\hat{F}\varphi_i = F_i \cdot \varphi_i$). A 3.axióma szerint így megkapjuk a szóban forgó dinamikai változó mérhető értékeit $\{F_1, F_2, F_3, \dots, F_i, \dots\}$. A kapott számítások a kísérletekkel összehasonlíthatók, azaz (és ez nagyon lényeges!) a használt elméleti modell fizikailag közvetlenül vagy közvetetten értelmezhető. A használt módszer egyszerűsített sémája tehát a következő:

"Klasszikus mechanika → Operátorok → Sajátérték egyenlet → Fizikai értelmezés → Mérés".

A továbbiakban mindig így fogunk hivatkozni rá!

Az imént elmondottak a természettudományos gondolkodásmód (paradigmarendszer) alapsémájának az alkalmazását jelenti a kvantummechanikában.

Ez a séma (az "egzakt" tudományok esetén) leegyszerűsítve a következő:

"Elmélet" → "Matematikai modell" → "Kvantitatív eredmények" → "Kísérlet"

Ez a természettudományos gondolkodásmód (a "régii görögöktől" napjainkig) több ezer év során szerzett ismeretek és tapasztalatok során alakult ki és bizonyult sikeresnek. Ennek nyomán az Emberiség egy "technikai civilizációt" hozott létre annak minden örömeivel és keserűségével együtt. Lehet filozofálgatni azon, hogy ez a civilizáció az "Embert" boldogabbá tette-e vagy sem (J.J. Rousseau óta sokan és sokat gondolkodtak már el ezen az "örökzöld" témán). A tény azonban tény marad: az Emberiség ezt az utat választotta a "bölcseleti civilizáció" helyett, jóllehet ennek csirái is megvoltak főleg a távolkeleti gondolkodási sémák mélyén.

A kísérletekkel (a tapasztalattal) való szembesülés azt a "természetes igényünket" fejezi ki, hogy a fizikában használt modelljeink "realisak" legyenek (azaz legyen "valóságtartalmuk"). Nem reális modellek lehetnek nagyon szépek, izgalmasak, emberközeliak és "lélekelmelők" (a vallási mítoszoktól kezdve a számtalan ezoterikus tanon át a hétköznapi babonákig) de ezeknek az "objektív" valóságtartalma a természettudományos szemlélet szerint (diplomatikusan fogalmazva) "erősen vitatható". Így ezek használata kívül esik a Fizika (mint tudomány) körein. Napjainkban az áltudományok (média által "felkapott") egyre hangosabb (és népszerűbb) képviselői miatt néha rákényszerülünk ilyen irányú tudományos vizsgálatokra is. De (a több százéves tapasztalatok szerint) ennek "józanító" hatása az áltudományokra nézve enyhén szólva is kétséges és így egy "fizikus számára" elveszett erőfeszítés. Talán ezért hallgatunk akkor is, amikor szólni kellene?! (Pl. "az örökmozgó" évenkénti feltalálása kapcsán.)

Mivel az operátorok kulcsfontosságú szerepet töltenek be a kvantummechanikai számításokban, ezért szükség van az általunk gyakran használt matematikai szabályok és tételek rövid összefoglalására. Itt elsősorban a matematikában a "lineáris terek" elméletében tanultakra alapozunk.

Rövid matematikai összefoglaló.

A háromdimenziós fizikai terünk geometriai tulajdonságait már régóta kutatja a gondolkodó Ember. A geometria a régi görög természetfilozófia egyik alapja volt. Az évszázadok során felgyülemlett geometriai ismertek rendszerbefoglalása Euklidesz nevéhez fűződik. Az alapfogalmakra és axiómákra épülő logikai

konstrukció a görög tudományos gondolkodás csúcsteljesítménye volt. Állításai (matematikáról lévén szó) azóta is érvényesek.

Az általánosítás lehetősége több oldalról is kínálkozott, egyrészt a háromnál több dimenzó, másrészt a komplex számok irányába. Így alakult ki aztán a Funkcionálanalízis, mint a matematika egyik fontos részterülete.

A lineáris tér (= vektor tér)

Adott $\Gamma = \{a, b, c, \dots\}$ komplex (vagy valós) számok halmaza, amelyeket „skalároknak” nevezünk. Legyen adva $L = \{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, \dots\}$ „absztrakt” elemek halmaza ezeket „vektoroknak” nevezzük. Itt most nem kell semmiféle konkrét algebrai, vagy geometriai objektumra gondolni, ezek legyenek valóban „absztrakt” elemek. A „felül vonás” (\bar{x}) jelölést azért vezettük be, hogy egy „vektor” láthatóan is különbözzön egy „skalártól” (a). A vektorok „L” halmazán értelmezzük a vektorok összeadása (jelölése: „+”) és a skalárral való szorzás (jelölése „·”) műveletét. Ez utóbbit gyakran nem jelöljük (azaz a „pontot” elhagyjuk).

Az „L” halmaz lineáris tér (vagy vektortér), ha teljesülnek a következő axiómák:
(„Ha A akkor B” logikai kifejezést „ $A \rightarrow B$ ”-vel fogjuk jelölni)

- 1.) $\bar{x}, \bar{y} \in L \rightarrow \bar{x} + \bar{y} \in L$
- 2.) $\bar{x} \in L$ és $a \in \Gamma \rightarrow a\bar{x} \in L$
- 3.) $\bar{x} + \bar{y} = \bar{y} + \bar{x}$ [a vektorok összeadása „kommutatív” művelet.]
- 4.) $(\bar{x} + \bar{y}) + \bar{z} = \bar{x} + (\bar{y} + \bar{z})$ [a vektorok összeadása „asszociatív” művelet]
- 5.) $\exists \bar{0}, \bar{x} + \bar{0} = \bar{x}$ [van „nulla vektor”, jelölés $\bar{0} \equiv \bar{0}$]
- 6.) $\exists (-\bar{x}), \bar{x} + (-\bar{x}) = \bar{0}$ [van „inverz” elem, jelölés: $\bar{x} + (-\bar{y}) \equiv \bar{x} - \bar{y}$.]
- 7.) $1 \in \Gamma, 1 \cdot \bar{x} = \bar{x}$
- 8.) $a, b \in \Gamma, a(b\bar{x}) = (ab)\bar{x}$
- 9.) $(a + b)\bar{x} = a\bar{x} + b\bar{x}$
- 10.) $a(\bar{x} + \bar{y}) = a\bar{x} + a\bar{y}$

Ha a skalárok valósak, akkor „valós lineáris térről”, ha komplexek, akkor „komplex lineáris térről” beszélünk.

Bevezethető a skalár szorzás művelete, amely a tér két tetszőleges „ \bar{x}, \bar{y} ” eleméhez egy „ (\bar{x}, \bar{y}) ” komplex számot rendel a következő axiómák szerint:

- 1.) $(\bar{x}, \bar{y}) = (\bar{y}, \bar{x})^*$
- 2.) $(\bar{x}, a\bar{y}) = a(\bar{x}, \bar{y})$
- 3.) $(\bar{x}_1 + \bar{x}_2, \bar{y}) = (\bar{x}_1, \bar{y}) + (\bar{x}_2, \bar{y})$
- 4.) $(\bar{x}, \bar{x}) \geq 0$

A normált terek

A lineáris (vektor) tér normált tér, ha létezik egy „léképzés”, amely az L vektortér minden „ \bar{x} ” eleméhez egy valós „ $\|\bar{x}\|$ ” számot rendel a következő axiómák szerint:

- 1.) $\|\bar{x}\| \geq 0$
- 2.) $\|a\bar{x}\| = |a| \cdot \|\bar{x}\|$
- 3.) $\|\bar{x} + \bar{y}\| \leq \|\bar{x}\| + \|\bar{y}\|$

A metrikus terek

Metrikus egy vektortér, ha létezik egy olyan leképzés, amely a tér bármely két " \bar{x}, \bar{y} " eleméhez egy " $r(\bar{x}, \bar{y})$ " valós számot rendel a következő axiómáknak megfelelően:

- 1.) $r(\bar{x}, \bar{y}) = r(\bar{y}, \bar{x})$
- 2.) $r(\bar{x}, \bar{x}) = 0$
- 3.) $r(\bar{x}, \bar{y}) + r(\bar{y}, \bar{z}) \geq r(\bar{x}, \bar{z})$

Euklideszi tér

Euklideszi a vektortér („E”), ha a normát a skalár szorzással definiáljuk (azaz. $L \equiv E = \{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, \dots\}$)

$$\text{Azaz } \|\bar{x}\| = \sqrt{(\bar{x}, \bar{x})} \text{ és } r(\bar{x}, \bar{y}) \equiv \|\bar{x} - \bar{y}\|$$

Hilbert tér

Hilbert térnek („H”) nevezzük a komplex Euklideszi teret. Azaz $H \equiv E = \{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, \dots\}$

A fentiekben nem kellett megmondani, hogy az absztrakt vektor tér $L = \{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, \dots\}$ elemei milyen konkrét matematikai objektumokkal valósítjuk meg.

A lineáris terek egy konkrét megvalósítását a tér **egy reprezentációjának** nevezzük.

A kvantummechanika megalkotása során kiderült, hogy az elméleten belül olyan függvényekkel kell dolgoznunk, amelyek Hilbertet alkotnak.

Azaz meg kell ismerkednünk a Hilbert tér egy adott függvényreprezentációjával.

A $H = \{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, \dots\}$ absztrakt Hilbert tér egy függvényreprezentációját a következőképpen fogjuk jelölni: $H = \{\alpha, \beta, \gamma, \dots, \varphi, \psi, \dots\}$. A halmaz $\alpha, \beta, \gamma, \dots, \varphi, \psi, \dots$ elemei adott tulajdonságú (a Hilbert tér axiómarendszerét kielégítő) komplex függvények.

Legyen tehát megadva, (a későbbiekben még részletezendő) ismert tulajdonságú "függvények" $H = \{\alpha, \beta, \gamma, \dots, \varphi, \psi, \dots\}$ halmaza! A matematikai összefoglalóban már láttuk, hogy ezek a tulajdonságok nagyon hasonlítanak egy véges dimenziós Euklideszi vektortér tulajdonságaira. Ezért az elnevezéseket is onnan vettük át.

Ezen a függvényhalmazon értelmezhetünk különböző transzformációkat. Ezeket a transzformációkat másként operátornak nevezzük. Általában egy transzformáció (operátor) a halmaz egy pl. β elemét a halmaz egy másik pl. φ elemébe visz át. Ezt így jelöljük: $\varphi = \hat{A}\beta$.

Egy \hat{A} **operátor lineáris**, ha eleget tesz az általános linearitási feltételnek. Az operátorok tehát tulajdonképpen a H (függvény)halmazon értelmezett lineáris transzformációk, amelyek a halmazt önmagára képezik le.

Az operátorok között két műveletet definiálunk az "összeadást" ($\hat{A} + \hat{B}$) és a "szorzást" ($\hat{A}\hat{B}$).

A H halmazon értelmezzük a "skalár szorzást". Ez a halmaz bármely két (α, β függvény) eleméhez egy $\langle \alpha | \beta \rangle$ komplex számot rendel a megadott (integrálási) definíció szerint.

Egy α függvény önmagával vett $\langle \alpha | \alpha \rangle$ skalár szorzatát "normának" nevezzük. Ez a skalár szorzat definíciójából fakadóan mindig egy valós szám. A H halmaz olyan függvényekből áll, amelyek normája véges mennyiség. Ezeket normálható függvényeknek nevezzük.

A normát definíciószerűen egynek választjuk, $\langle \alpha \alpha \rangle = 1$.

Két függvény, α és β "ortogonális", ha a skalár szorzatuk zérus, azaz $\langle \alpha | \beta \rangle = 0$.

A skalár szorzat felhasználásával minden \hat{A} operátorhoz hozzá tudunk rendelni egy másik \hat{A}^+ ún. "adjungált" operátort a következő képpen: $\langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A}^+ \varphi | \psi \rangle$.

Egy operátor önadjungált, ha adjungáltja megegyezik önmagával $\hat{A} = \hat{A}^+$. Azaz $\langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A} \varphi | \psi \rangle$

Az önadjungált operátoroknak kiemelt szerepe van a kvantummechanikai alkalmazásokban. Ennek oka az, hogy az önadjungált operátorok sajátértékei valósak (1.Tétel).

Azaz, ha $\hat{A}^+ = \hat{A}$ és $\hat{A}\alpha = A \cdot \alpha$, akkor $A^* = A$

Így (a már közölt harmadik kvantummechanikai axióma értelmében) a dinamikai változókhoz önadjungált operátorokat kell rendelni, hiszen minden mérési eredmény csak valós szám lehet.

Az önadjungált operátorok másik, a fizikai alkalmazások szempontjából igen fontos tulajdonsága az, hogy a különböző sajátértékűkhöz tartozó sajátfüggvényei ortogonálisak egymásra (2.Tétel).

OROSZ L. Kvantummechanika 36.oldal

Az ortogonalitás igen fontos tulajdonság. Gondoljunk például arra, hogy segítségével elemi módon, szemléletesen értelmezni tudjuk az egy, két és a háromdimenziós (geometriai) terek egymásra-épülését. Az, hogy az általunk ismert fizikai tér a tapasztalataink szerint háromdimenziós, ez más kérdés! Mint láttuk, a konkrét geometriai (háromdimenziós) térünk egyfajta általánosítás kiindulópontjának tekinthető. Matematikai absztrakciónk képes arra, hogy tetszőleges, háromtól különböző dimenziós, absztrakt tereket is leírjunk és használjunk.

Egy függvényrendszert ortonormálnak hívunk, ha az elemei lineárisan függetlenek, a normájuk egy és az elemek páronként ortogonálisak egymásra. A H függvénytér fontos tulajdonsága az, hogy mindig kiválasztható belőle egy B ortonormált függvényrendszer. Ezt a B függvényrendszert a tér bázisának mondjuk és az α_i elemeit bázisfüggvényeknek nevezzük azért, mert a H függvénytér bármelyik ψ eleme felírható az α_i bázisfüggvények lineáris kombinációjaként. Erre azt mondjuk, hogy a H függvénytér "teljes tér", mert elemei egy bázis szerint sorbafejtethők. A bázisfüggvények száma éppen a tér dimenziószámát adja. (Láthatóan helyzet, és ezért a szóhasználat is, ugyanaz mint a már megszokott és ezért szemléletes háromdimenziós tér esetén.) Mivel (jelen esetben) a H függvénytér α_i bázisfüggvényeinek a száma végtelen ($i = 1, 2, 3, \dots, \infty$), így a H egy végtelen dimenziójú euklideszi tér. Mint ismeretes, a "végtelen" a matematikában nem mennyiség, hanem minőség! Így a "végtelen dimenziós euklideszi" tér néhány tulajdonsága kissé eltér a véges dimenziósokétól. Ez azt jelenti, hogy van néhány olyan tulajdonság, ami a véges dimenziós euklideszi terekben triviálisan teljesül de a végtelen dimenziós térben már nem (pl. egység élhosszúságú kocka "átlós csúcspontja" nem eleme a térnek). Ezért bizonyos kikötéseket kell tennünk annak érdekében, hogy a tér továbbra is "euklideszi" maradjon.

Mindenesetre azokat az euklideszi tereket, amelyekben a "számok" a "komplex számokat" jelentik Hilbert térnek nevezzük (függetlenül annak dimenziójától). A matematikusok azt mondják, hogy a Hilbert tér nem más, mint a "komplex számtest felett értelmezett euklideszi tér".

Mivel a H tér minden φ elemének a normája egy, ezért ez a B bázis szerinti a_i sorfejtési együtthatókra nézve egy megkötést jelent. Az a_i sorfejtési együttható a φ függvénynek és az α_i bázisfüggvény $\langle \alpha_i | \varphi \rangle$ skalár szorzatával egyenlő. A B bázis a H -n értelmezett bármelyik operátor sajátfüggvény-rendszere lehet.

Ezen rövid és koránt sem teljes matematikai összefoglalás után kimondhatjuk a kvantummechanika **első axiómáját** is :

Egy részecske (pl. egy elektron) állapotaihoz a H Hilbert tér elemeit rendeljük.

Ez azt jelenti, hogy a (fizikai) elektronállapotokat a számításaink során (matematikai) függvények reprezentálják, azaz jelenítik meg.

Ebben az axiómában (is) egy igen fontos tapasztalati tény fogalmazódik meg. A mikrofizikai jelenségeknek ugyanis van egy (a klasszikus jelenségeknél nem tapasztalt és ezért a hétköznapi szemléletünk számára egyáltalán nem szemléletes) sajátossága, amit az ún. "szuperpozíció elvében" fogalmazzunk meg. Eszerint, ha egy mikrofizikai objektum felvehet két különböző állapotot, akkor felveheti ezen állapotok "valamiféle vegyülékét" is. Ezt nevezzük a két állapot "szuperpozíciójának", amit a matematika nyelvén az állapotokhoz rendelt hullámfüggvények lineáris kombinációjával adunk meg. (Ne felejtjük el, hogy most a számok komplex számokat jelentenek!) Látható, hogy a "szuperpozíció" ténye matematikailag a Hilbert téren, igen egyszerűen megfogalmazható, ugyanakkor nehezen tudjuk (sőt szinte lehetetlen is) ezt a jelenséget hétköznapi fogalmainkkal képszerűen leírni. Ennek ellenére (mint azt majd látni fogjuk) a klasszikus szemmel nézve furcsa tapasztalatok sokasága bizonyítja ezen első axióma realitását.

"Hiába, a Kvantummechanika megértéséhez csak a Kvantummechanikán keresztül vezet az út!" (O.L.)

OROSZ L. Kvantummechanika 37. oldal

1.2.2. Az operátorok felcserélési törvényei

Az általunk használt Schrödinger féle kvantummechanikai modellben (ezt Schrödinger féle reprezentációnak is szokták nevezni) már meghatároztuk a helykoordinátákhoz és az impulzus komponensekhez rendelt operátorokat. Érdekes megvizsgálni azt, hogy ha két operátor (egymás után) hat egy függvényre, akkor számít-e az operátorok sorrendje. Láttuk azt, hogy ha két operátor egymás után hat egy függvényre, akkor azt az "operátorok szorzási" műveletével fejezzük ki. Az operátorok között definiáltuk az összeadás (különbség) műveletét is. A két operátorból ennek a két algebrai műveletnek a kombinációjával egy újabb operátor képezhető, amelyet a két operátor ún. "kommutátorának" hívunk. Ha a kommutátor(operátor) zérus, akkor ez azt jelenti, hogy a két operátor egymás utáni alkalmazásakor a sorrendjük felcserélhető. Röviden azt mondjuk, hogy "a két operátor felcserélhető". Mint azt majd látni fogjuk a kommutátoroknak igen fontos szerepe van a kvantummechanikai méréselméletben. Emiatt valójában nem is az a fontos, hogy az alaplmenyiségekhez (koordináta és impulzus) milyen operátorokat rendelünk, hanem az, hogy ezeknek a kommutátorai mivel egyenlőek. Ezeket "felcserélési törvényeknek" vagy "kommutációs relációknak" nevezzük.

A második axiómánkat ki kell tehát egészítenünk avval, hogy megadjuk a koordináta és impulzuskomponensek között fennálló felcserélési törvényeket.

OROSZ L. Kvantummechanika 38. oldal

Fontos tétel a következő:

Ha két operátor felcserélhető, akkor a sajátfüggvény-rendszerük megegyezik.

Két esetet különböztethetünk meg.

Az első esetben a két (függvény)operátor olyan, hogy különböző változójú függvényekre hatnak. Ekkor a közös sajátfüggvény-rendszer a két operátor sajátfüggvényeinek a szorzatából áll.

A másik esetben a két operátor olyan, hogy az egyik operátor a másiknak egy hatványsorba fejthető függvénye. Ez létezhet, hiszen az operátorok összeadása és szorzása jól definiált műveletek. Ekkor a két operátor sajátfüggvényei ugyanazok lesznek és a sajátértékek mintegy öröklők az operátorok közötti függvénykapcsolatot is.

OROSZ L. Kvantummechanika 39. oldal

1.2.3. A kvantummechanikai méréselmélet alapjai

Láttuk azt, hogy a $\Psi(\vec{r}, t)$ állapotfüggvény Born féle fizikai értelmezése egy olyan intuitív kijelentés volt, amelyet a mérési tapasztalatok igazoltak. (Intuíció: a dolgok lényegének ösztönös felismerése)

Az elektronra (mikro részecskékre) vonatkozó valószínűségi kijelentések csak a méréseken keresztül értelmezhetőek. Ezért szükség lesz majd a "mérés" fogalmának a precíz definiálására. Addig is a "mérésen" a klasszikus fizikában már megszokott eljárást fogjuk érteni. A mérést magát egy mérőrendszer végzi. Ez egyrészt tartalmaz egy olyan berendezést, amely egy adott állapotú elektron (vagy egyéb részecske) előállítására alkalmas, másrészt egy mérőműszert, amelyik az ezen az elektronon (részecskén) végrehajtott mérés eredményét kijelzi. A mérőrendszert egy blokk diagrammal szemléltethetjük. A mérőrendszer mindkét része igen bonyolult lehet. Gondoljunk csak azokra a hatalmas részecskegyorsítókra, amelyekkel a földi körülményekhez képest igen különleges állapotú részecskéket lehet "gyártani". Valamint azokra az igen bonyolult számítógépek által vezérelt detektorokra, amelyek a mérőműszer szerepét töltik be. A funkció a lényeg, nem a bonyolultsági fok! Egy mérőműszer természetesen csak egyféle dinamikai változó mérésére alkalmas (hiszen egy adott méréskor csak egyféle eredményt jelezhet). Így beszélhetünk, pl.: helymérés, impulzusmérő, energiamérő, stb... műszerekről.

A negyedik axiómához a hullámfüggvény valószínűségi értelmezésének az általánosításán keresztül juthatunk el, a következőképpen. Legyen adva egy φ állapotú elektron (1.axióma)! Az egyszerűség végett tételezzünk fel egy egydimenziós modellt, azaz $\varphi(x)$ állapotfüggvény csak az x koordinátának legyen a függvénye! Legyen ebben az állapotban az elektron energiája E (3.axióma)! Ez azt jelenti, hogy ha valahányszor megmérünk a φ állapotú elektron energiáját arra mindig E értéket kapnánk. Ezért az energiamérés átlaga is E lesz. Ezt az E értéket, mint az energiamérés átlagát, a $\varphi(x)$ állapotfüggvény ismeretében a Schrödinger egyenletből egy skalár szorzat segítségével ki tudjuk számítani: $\langle E \rangle_\varphi = \langle \varphi | \hat{A} | \varphi \rangle$. Ugyanekkor a $\varphi(x)$ állapotfüggvény ismeretében, a Born-féle valószínűségi értelmezés felhasználásával ki tudjuk számítani a helymérés várható értékét (a helymérés átlagát) is: $\langle x \rangle_\varphi = \langle \varphi | \hat{x} | \varphi \rangle$. Azt tapasztaljuk, hogy mind az energiamérés, mind pedig a helymérés várható(átlag)értékére formailag ugyanolyan típusú matematikai kifejezést kapunk. Ezek után az eredményeink általánosíthatóak. Azaz kimondjuk a **negyedik axiómát**, amely szerint:

"Egy tetszőleges φ állapotú elektron (részecske) esetén, egy tetszőleges "A" dinamikai változó mérésének a várható (átlag) értéke a $\langle \varphi | \hat{A} | \varphi \rangle$ skalár szorzat segítségével számítható ki."

;

OROSZ L. Kvantummechanika 40. oldal

Mielőtt tovább mennénk, iktassunk be "pihentetőnek" illetve "kedvcsinálónak" egy kis "Filozofikus Kőzjátékot":

Az eddigiekben megalkottuk a kvantummechanika axiómarendszerét. Az axiómarendszer helyességét a mérési eredmények igazolják. Mi ezt (a szakmai érdeklődésünknek és a céljainknak megfelelően) az elektron(ok) viselkedésének a leírására fogjuk felhasználni. Így az alkalmazott matematikai egyenleteink is ennek felelnek majd meg. Ez azonban nem azt jelenti, hogy a kvantummechanika közölt axiómái csak az elektronokra érvényesek. Ugyanez az axiómarendszer, de egy általánosabb és absztraktabb formában, alkalmas a ma ismert valamennyi mikrofizikai jelenség leírására is. Mi ezzel a tanulmányaink során nem tudunk foglalkozni. De jó az, ha tudjuk, hogy a felírt axiómákkal egy olyan szemlélethez és paradigma rendszerhez (gondolkodási sémák rendszeréhez) jutottunk, amellyel a ma ismert (majdnem!) valamennyi fizikai jelenség (a gravitációt kivéve!) tárgyalható. A fizikusok vágya az, hogy az ismert négy kölcsönhatás (úgy, mint az erős, gyenge, elektromágneses és gravitáció) egyetlen egy kölcsönhatásból levezethető legyen. Eddig a gravitáció még kicsúszott a kezeink közül, de a másik három már valamiféle egységbe vonható. Az úton tovább kell haladni, bár az elméleti nehézségek óriásiak.

Az út neve a "GUT = Grand Unification Theories = Nagy Egyesítési Elméletek".

Az eddigi kísérleti és elméleti részecskefizikai ismereteink lehetővé teszik, hogy megbízhatóan reprodukáljuk az univerzum állapotát a nagy robbanást követő 10^{-18} (!!!)másodperctől kezdve napjainkig. De még sejtelmünk sincsen arról, hogy milyen meglepetéseket tartogat a Természet, ha születésének korábbi titkait kutatjuk. Az eddigi úton (GUT) mindvégig azt a kvantummechanikát használtuk, amelynek egyszerűsített változatát az előzőekben "kitaláltuk".

Joggal mondhatjuk, hogy a KVANTUMMECHANIKA az emberiség szellemi alkotásainak a csúcsa. Teljesítőképesége (az Univerzum titkainak a feltárása) és gyakorlati használhatósága (mai modern technológiák) minden eddigi szellemi alkotás fölé emelik ŐT! .

OROSZ L. Kvantummechanika 41.oldal

Ezen kis kitérő után térjünk vissza a kvantummechanikai méréselmélet kidolgozásához.

Láttuk azt, hogy a 3. és a 4. axióma a részecskék dinamikai jellemzőinek a mérésével kapcsolatosan tesz alapvető kijelentéseket. Szükség van tehát annak a pontos definiálására, hogy mit is kell értenünk "mérésen" a kvantummechanikában.

Induljunk ki a triviális esetből! Ekkor az elektron egy olyan állapotban van, amelyet egy olyan α_i függvény reprezentál (1. axióma), amelyik a mérendő \mathbf{A} dinamikai változóhoz rendelt \hat{A} operátor (2. axióma) i-edik sajátfüggvénye, azaz $\hat{A}\alpha_i = A_i \cdot \alpha_i$. Ekkor, valahányszor "megmérjük" az \mathbf{A} dinamikai változót, mindannyiszor az A_i sajátértéket kapjuk (3. axióma). A mérendő dinamikai változó szempontjából azt mondhatjuk tehát, hogy az elektron a mérés előtt egy "sajátállapotban" volt és a mérés során mindvégig abban is maradt. Ezen hosszú és bonyolult mondatok helyett röviden azt szoktuk mondani, hogy az elektron egy α_i "sajátállapotban" volt és a mérés "sajátállapotban" történt.

Bonyolultabb az eset akkor, amikor az elektron olyan állapotban van, amelyet egy olyan φ függvény reprezentál (1. axióma), amelyik nem tartozik a mérendő \mathbf{A} dinamikai változóhoz rendelt \hat{A} operátor (2. axióma) sajátfüggvényei közé. Ekkor pongyolán, de röviden azt mondjuk, hogy a mérést "nem sajátállapotban" végezzük. Mi lesz ekkor a mérés eredménye? Keressük meg azt az axiómát, amelyik közvetlenül választ adhat erre a kérdésre! Ez csak a 4. axióma lehet, hiszen a 3. axióma közvetlenül csak a sajátállapotban történő mérésre alkalmazható. Azaz a szóban forgó esetben a megméréndő \mathbf{A} dinamikai változó várható(átlag)értékét tudjuk csak előre kiszámítani. Szükség van tehát arra, hogy precízen megmondjuk, hogy mit is jelent a kvantummechanikai mérés során a várható(átlag)érték méréssel történő meghatározása. Ezen (egyáltalán nem triviális) kísérleti kiértékelési mód megadása igen szemléletesé válik, ha előbb néhány, egyszerű elméleti megfontolást teszünk.

Elemi számolással és az axiómák felhasználásával a kérdéses várható értékre (az átlagértékre) egy igen fontos matematikai kifejezést kapunk. A levezetés során felhasználtuk azt, hogy az \mathbf{A} dinamikai változóhoz rendelt \hat{A} operátornak az A_i sajátértékeihez tartozó α_i sajátfüggvényei a Hilbert tér egy bázisát adják és így a φ állapotfüggvény ezen bázisfüggvények szerint sorbafejthető. A sorfejtési együtthatókat a_i jelöli. Eredményül az adódik, hogy a mérés átlagértéke (a várható érték) az A_i sajátértékeknek $|a_i|^2$ -el súlyozott összege lesz,

azaz: $\langle A \rangle_\varphi = \sum_i |a_i|^2 A_i$. A súlyozási együtthatók az a_i sorfejtési együtthatókkal fejezhető ki. A φ

állapotfüggvény normája miatt az $|a_i|^2$ súlyozási együtthatók összege egy: $\sum_i |a_i|^2 = 1$. Az eredmény az

elemi valószínűség számításban tanultak alapján matematikailag könnyen értelmezhető.

A fizikai értelmezéshez további megfontolások szükségesek.

A mondandónk jobb kifejezhetősége végett finomítsuk a szóhasználatunkat és vezessük be az "elemi mérés" és a "mérés" fogalmát. Ez a két fogalom némileg hasonlít a valószínűs égszámításban használt "elemi esemény" és "esemény" fogalmakhoz. Bevezetésének didaktikai célja van. Az irodalomban **nem !! található** meg, mert ott mindkét fogalomra ugyanazt a "mérés" szót használják. A szöveggörnyezetből következik, hogy pontosan melyik fogalomról van éppen szó.

Elemi mérésnek fogjuk nevezni azt, amikor egy valamilyen állapotban lévő elektron (részecske) kölcsönhatásba lép a mérőműszer detektorával és ennek hatására az egy adott "értéket jelez". Pongyolán, de röviden azt fogjuk mondani, hogy a mérőműszerünket "rákapcsoltuk" az adott állapotú elektronra (részecskére) A 3. axióma értelmében egy elemi mérés eredménye csak egyetlen egy sajátérték lehet. Ha egy adott állapotú elektronon ugyanazon dinamikai változónak sok elemi mérését hajtunk végre, akkor a dinamikai változó méréséről beszélünk.

Nézzük meg, hogy az imént bevezetett fogalmak segítségével a tárgyalt méréseket hogyan tudjuk értelmezni (interpretálni).

A "sajátállapotban történő" mérés során \mathbf{A} dinamikai változó mérését egy α_i sajátállapotban hajtjuk végre, akkor minden elemi mérés eredménye ugyanaz az A_i sajátérték lesz. A mérés eredménye tehát az A_i sajátérték maga.

OROSZ L. Kvantummechanika 42. oldal

Mint azt láttuk, a "nem sajátállapotban történő mérés" esetén a mérés várható értéke a mérendő dinamikai változó sajátértékeinek súlyozott átlagaként számítható ki. A valószínűség számításban tanultak értelmében az $|a_i|^2$ súlyozó együtthatókat valószínűségekként kell értelmeznünk. Ez most az alábbi módon tehető meg:

Tekintsünk egy φ állapotú elektront! MÉRJÜK meg ennek az elektronnak azt a fizikai tulajdonságát, amelyet az \mathbf{A} dinamikai változóval jellemzünk! Ha ezen a φ állapotú elektronon egy elemi mérést végrehajtunk, akkor ennek eredménye a 3. axióma szerint csak valamelyik A_i ($i = 1, 2, 3, \dots$) sajátérték lehet. Végezzünk el N db elemi mérést, de ügyeljünk arra, hogy minden elemi mérés előtt az elektron ugyanabban a φ állapotban legyen. A mérés tehát most N db elemi mérésből áll. Minden egyes elemi mérés eredménye (véletlenszerűen!) valamelyik sajátérték lesz. Most a mérés eredményének azt a hisztogramot tekintjük, amelyik az elemi mérések során adódó A_i ($i = 1, 2, 3, \dots$) sajátértékek relatív gyakoriságát tartalmazza. Ez azt jelenti, hogy N db elemi mérés közül N_i esetben adódott A_i sajátérték. A valószínűség számításban tanultak alapján $N \rightarrow \infty$ esetén az A_i sajátérték N_i/N relatív gyakorisága annak a valószínűségét adja, hogy egy elemi mérés eredménye éppen A_i lesz.

A kvantummechanikában a mérés tehát az alábbi módon interpretálható. A mérés előtt az elektron valamilyen φ állapotban van. Az, hogy ismerjük-e ezt az állapotot vagy sem most nem lényeges. A gyakorlatban mind a két eset előfordul. Egyszerűen tekintsük adottnak ezt a φ állapotot. Meg akarjuk mérni az \mathbf{A} dinamikai változót. Rákapcsolva az \mathbf{A} dinamikai változót mérő műszert a rendszerre (egy elemi mérést végrehajtva) a műszer valamelyik A_i sajátértéket fogja mutatni. De ez egyben, a 3. axióma szerint, azt is jelenti, hogy az elektronunk éppen α_i állapotban van. Azaz az elemi mérés során az elektron a kezdeti φ állapotból a mérőműszerrel való kölcsönhatás következtében az α_i állapotba ment át. Az elemi mérés előtt csak azt tudjuk megmondani, hogy mi annak a valószínűsége, hogy az elektron φ állapota pl. α_i állapotra fog változni. Azt mondjuk erre, hogy "elemi mérés pillanatában(!)" dől az el, hogy melyik állapot fog létrejönni (realizálódni).

Tehát egy elemi mérés kimenetelére (általában az események bekövetkezésére) a kvantummechanika "ab ovo" (eleve azaz már az axiómák szintjén!) csak valószínűségi kijelentéseket tud tenni.

Ez alapvetően más, mint az, amit a klasszikus fizikában (mechanikában) tapasztaltunk. Ott a valószínűségi kijelentések mögött mindig egy szigorúan kauzális (ok-okozati) "alvilág" húzódott meg. Gondoljunk pl. a statisztikus fizikában tanultakra, ahol a gázmolekulák mindegyike az egzakt Newton törvények szerint mozgott, azaz bármelyik molekula mozgása elvileg determinisztikus volt. Praktikus okokból (a 10^{23} nagyságú, hatalmas részecskeszám miatt) tértünk rá a statisztikus tárgyalásra. Mindez azonban az elméleti, elemi alapokat nem érintette.

Mindez azért izgalmas dolog, mert a kvantummechanikában a Természet (jelenlegi ismereteink szerinti) legalapvetőbb törvényeit foglalmaztuk meg. A klasszikus fizika szigorú kauzalitásán nevelkedett szemléletünk számára nagyon meghökkentő kijelentés az, hogy a Természet alaptörvényei véletlenszerűek. Azaz nincsen egy kauzális "alvilág" a kvantummechanikai események mögött (hiszen, ha lenne, akkor az axiómáink nem lennének alaptörvények). Legalább is eddig még ilyet senki soha nem tapasztalt! Ez az "okok nélküli véletlen" nehezen emészthető fogalom. Nagyon úgy néz ki, hogy Einstein kételkedése ellenére az Úristen mégis csak kockajátékos!

Az elmondottak filozófiai következményei beláthatatlanok.

Különösen ismeretelméleti vonatkozásai izgalmasak, ezért óvakodnunk kell az elhamarkodott és felületes kijelentésektől!

1.2.4. A koordináta és az impulzus kvantummechanikai tárgyalása

Mint azt láttuk, a 4. axiómához a hullámfüggvény Born féle értelmezésének az általánosításával jutottunk el. Most nézzük meg azt, hogy a 4. axiómából hogyan jön ki a Born féle értelmezés! Mint az ismeretes, ebben az esetben azt tudjuk megmondani, hogy mekkora valószínűséggel található meg az elektron a tér egy tetszőleges pontjában. Tehát helymérésről van szó. Az egyszerűség végett egydimenziós modellen fogunk dolgozni. A bevezetett sémánk szerint a mérőrendszerünk most egy $\varphi(x)$ állapotú elektronból és egy helykoordináta mérő műszerből áll. A helymérés eredménye a tapasztalatok szerint bármekkora lehet. Azaz az X dinamikai változóhoz rendelt \hat{x} operátor sajátértékei folytonos spektrumot adnak. Ez némi nehézséget jelent a további matematikai lépésekben. Azért, hogy ezt könnyebben elviseljük, mindent a már megtanult diszkrét spektrum mintájára fogunk csinálni. Így pontosan tudni fogjuk azt, hogy honnan hová akarunk eljutni. Mint azt említettük, az \hat{x} operátor x sajátértéke bármilyen valós szám lehet, ezért a sajátértékek és így a sajátfüggvények halmaza "kontinuum számosságú". Ez azt jelenti, hogy a sajátértékek ill. a sajátfüggvények nem számlálhatók meg. Ezért nem alkalmazhatunk egy $i=1,2,3,..$ számláló indexet. Ehelyett bevezetünk egy folytonosan változó paramétert, amely átveszi a számláló index szerepét, és a sajátfüggvények megkülönböztetésére szolgál. Célszerű ennek az azonosító paraméternek magát a (folytonos) sajátértéket választani. Így tehát a $\chi(x, x')$ sajátfüggvényben az x betű a változót az x' szimbólum pedig az azonosító paramétert jelöli. Ez azt jelenti, hogy az x' sajátértékhez tartozó, x változótól függő függvényről van szó. A levezetés menete mindenben követi a már jól ismert diszkrét spektrumú esetet. Annyi csak a különbség, hogy a (diszkrét) szummázások helyett most (folytonos) integrálokat kell használni. A levezetés célja meghatározni azt, hogy mi annak a valószínűsége, hogy a kezdetben $\varphi(x)$ állapotú elektron az elemi helymérés hatására a $\chi(x, x')$ állapotba megy át. Ez más szavakkal azt is jelenti, hogy meghatározzuk annak $P(x')$ valószínűségét, hogy a helymérés eredménye x' lesz, azaz, hogy az elektront az x' helyen találjuk. Hasonlóan a diszkrét esethez ez a valószínűség most is a $\langle \chi | \varphi \rangle$ skalár szorzattal kapcsolatos.

A $P(x')$ valószínűség meghatározásához ismernünk kell az \hat{x} operátornak a $\chi(x, x')$ sajátfüggvényeit. Mi a Schrödinger féle operátorokat használjuk, ezért az \hat{x} operátor az x -el való szorzást jelenti. A sajátérték egyenletből látszik az, hogy a $\chi(x, x')$ sajátfüggvény nem tartozhat az eddig használt H függvénytér elemei közé. Valójában nem is tekinthető a hagyományos értelemben vett függvénynek. A függvényfogalom általánosításával kapható ún. disztribúciók közé tartozik és Dirac-deltának hívják. A nevét P.A.M. Dirac-ról kapta, aki először oldotta meg ezt a sajátérték problémát. Ezek után már meghatározható a $\langle \chi | \varphi \rangle$ skalár szorzat és így a keresett valószínűség is. Eredményül a várt Born-féle kifejezést kapjuk.

Az előzőekben meghatároztuk a helykoordináta operátor sajátfüggvényeit. Oldjuk most meg a másik alapmenyiségre, az impulzusra vonatkozó sajátérték problémát is. A p_x , p_y és p_z impulzus komponensékhöz tartozó operátorok egymással felcserélhetők és egymástól független változókra hatnak. Ez azt jelenti, hogy közös sajátfüggvény-rendszerük van, ami a különböző változójú sajátfüggvények szorzatából áll. (Lásd a 38.oldalon elmondottakat.) Eredményül azt kapjuk, hogy az impulzus sajátértékei és sajátfüggvényei éppen a jól ismert, a de-Broglie által intuitív módon bevezetett síkhullámok. Ez pont összhangban van az eddigiekkel.

Láttuk tehát, hogy sem a helykoordináta operátor sajátfüggvényei (Dirac delta disztribúciók) sem pedig az impulzus operátor sajátfüggvényei (nem normálható síkhullámok) nem tartoznak a H Hilbert tér elemei közé.

Belátható azonban, hogy ezek az állapotfüggvények előállíthatók a Hilbert tér elemeinek "határértékeként". Ezért (egy lehetséges módszerként) ezeket a "állapotfüggvényeket" is hozzávesszük a H halmazhoz, és az így kiegészített H^* téren fogjuk értelmezni az 1. axiómát.

OROSZ L. Kvantummechanika 46. oldal

1.2.5. A határozatlansági reláció

A helyes kvantummechanikai szemléletünk kialakításának egyik igen fontos állomásához érkeztünk. A kapott összefüggések alapján végérvényesen szakítanunk kell a megszokott klasszikus fogalmainkkal és egy másfajta gondolkodásmódot kell önmagunkban kialakítanunk. Mindez nem nélkülözhet némi filozófiai kitérőt sem.

Tekintsünk egy φ állapotú elektront és mérjük ezen két dinamikai változót (legyen ez A és B)! Vigyázzunk most is arra, hogy minden elemi mérés előtt az elektronunk φ állapotban legyen! A mérés eredménye két hisztogram lesz, amely a két dinamikai változó sajátértékeinek relatív gyakoriságait tartalmazza. Az axiómák segítségével előre meghatározhatók a két hisztogram jellemző adatai. Ezek a várható értékek (átlagértékek) és a négyzetes szórások. A várható(átlag) értékeket a 4. axióma alapján közvetlenül kiszámíthatjuk. Nézzük meg van-e valamiféle kapcsolat a két szórás (ΔA és ΔB) között? A kérdés indokolt, hiszen a két mérést ugyanabban a φ állapotban lévő elektronon történik.

A szórások kiszámításánál is a kvantummechanikai módszereit kell követnünk. Először is a szórás klasszikus definícióját lefordítjuk a kvantummechanika "nyelvére", majd az axiómák felhasználásával elvégezzük a szükséges számításokat.

A szórás matematikai definíciója a következő: "az átlagtól való eltérés négyzetének az átlagából vont négyzetgyök." A kvantummechanikai számításokban az "átlagot" a 4. axióma előírása szerint kell képezni. Ehhez pedig szükség van az "átlagtól való eltérés" ($\hat{\Delta A}$ illetve $\hat{\Delta B}$) operátorára. Ezt az operátort a 2. axióma szerint kell képeznünk. Azaz először megadjuk a klasszikus definíciót, majd utána a dinamikai változók helyébe operátorokat írunk. Az átlagérték nem dinamikai változó, hanem egy skalár érték, ezért a hozzá rendelt operátor az ezzel a számmal való szorzás lesz. A két dinamikai változó kvantummechanikai viszonyát a hozzájuk rendelt \hat{A} és \hat{B} operátorok csererelációja adja meg. Egyszerűen bizonyítható, hogy a $\hat{\Delta A}$ és $\hat{\Delta B}$ operátorok között is ugyanez a cserereláció érvényes. Képezzük a $\hat{G} = g \cdot \hat{\Delta A} + j \cdot \hat{\Delta B}$ operátort, ahol g tetszőleges valós paraméter. \hat{G} nem reprezentál semmilyen dinamikai változót, mert nem önadjungált. Egyszerűen egy matematikai segédmenynységnek kell tekintenünk. Képezzük a $\hat{G}\varphi$ függvény normáját, amelyik definíció szerint egy nem negatív valós mennyiség. Jelöljük ezt $I(g)$ -vel. Az adódik, hogy $I(g)$ a valós g paraméter négyzetes függvénye.

OROSZ L. Kvantummechanika 47. oldal

Ahhoz, hogy $I(g)$ ne legyen negatív, az szükséges, hogy a "g" paraméter megfelelő együtthatóiból képzett "diszkrimináns" ne legyen pozitív. Ebből a feltételből a ΔA és ΔB szórásokra egy egyenlőtlenség adódik. Ez az ún. Heisenberg féle határozatlansági reláció. Eszerint ha a két dinamikai változóhoz rendelt két operátor nem cserélhető fel, akkor a szórások szorzata nagyobb, mint egy pozitív szám. Ez azt jelenti, hogy nem létezik olyan állapot, amely esetén mindkét dinamikai változó "egyszerre" nulla szórással mérhető.

Tekintsük az x és a p_x között fennálló határozatlansági relációt Eszerint az elektron lehet például egy olyan állapotban, hogy a helye közel nulla szórással mérhető. Azaz az elektron tér egy meghatározott pontjának nagyon kicsi környezetében található. Ekkor azonban az impulzusmérés szórása nagyon nagy lesz, azaz erről semmi biztosat nem tudunk mondani. Ugyanakkor viszont, van olyan állapotú elektron is, amelynek az impulzusa egy jól meghatározott érték. Ekkor viszont az elektron helymérése lesz nagyon bizonytalan.

Eddig mindig azt mondtuk, hogy egy φ állapotú elektronon N (sok) elemi mérést végzünk. Ezt azonban nem lehet megvalósítani! Ennek az oka a következő. Amikor az elemi mérés során az elektron a mérőműszer detektorával kölcsönhatásba lép, akkor ott mindig reális (mikro)fizikai objektumokkal találkozik

(atomokkal, ionokkal, elektronokkal, elektromágneses térrel, stb...), hiszen a mérőműszer is az anyagi világunk része. A kölcsönhatás során a mérendő elektron mintegy "elkeveredik" a mérőműszert alkotó elektronok között. Mivel minden elektron teljesen egyforma, így őt onnan már visszavenni nem lehet. Azaz egy elemi mérést csakis egy elektronon és csak egyetlen egyszer lehet elvégezni. Akkor hogyan lehet értelmezni az N (sok) elemi mérésből álló mérést? A válasz egyszerű, ha figyelembe vesszük azt, hogy minden elektron tökéletesen egyforma, azaz nem lehet őket egymástól megkülönböztetni. Eszerint nem egyetlen φ állapotú elektronon mérünk N (sok)-szor, hanem N (sok) azonos φ állapotú elektronon mérünk egyszer. Az eredmény nyilván ugyanaz lesz. A két dinamikai változó "egyszerre" történő mérése is hasonlóan történik. Ekkor a sok azonos φ állapotú elektron felén megmérjük az egyik, a másik felén megmérjük a másik dinamikai változót. Az így kapott szórások között a Heisenberg féle határozatlansági reláció fog fennállni. Az elektronok egyformasága miatt a sok független elektronon történő mérésből adódó fizikai következtetéseinket egy elektron (helyesebben: "az" elektron) tulajdonságainak tekintjük. Ilyen módon alakítottuk ki szemléletünket. Ezért beszélhettünk az előzőekben mindig "egy (!) elektron"-ról.

A fontossága miatt foglaljuk össze a határozatlansági relációról hallottakat. A középiskolában azt tanultuk, hogy "egy elektron helyét és impulzusát nem lehet egyszerre pontosan meghatározni". Ez a megfogalmazás könnyen félreérthető, mert nem tisztázza az "egyszerre" szó jelentését. A most tanultak szerint a precíz állítás az, hogy: "Nincsen olyan állapot, amelyben lévő elektronok sokaságán elvégezve a hely- és az impulzuserő mérést, mindkét mérés szórása tetszőlegesen kicsinek adódik." Az "egyszerre" szó tehát szigorúan véve nem egyidejűsége utal, hanem az ugyanabban az állapotban történő mérést jelenti. Kvalitatív szemléletünkben, egyetlen elektron dinamikai tulajdonságainak jellemzésekor, mégis joggal asszociálunk az egyidejűsége. Hiszen egy objektum (elektron) a tulajdonságaival minden időpillanatban egyszerre rendelkezik. De ezzel ismét a filozófia (az ismeretelmélet) területére tévedtünk és ez már nem tartozik ennek a tantárgynak a témájába.

A határozatlansági reláció alapvető szerepet játszott a kvantummechanikai szemléletünk kialakulásában. A mikrofizikai modelljeink kvalitatív értelmezésekor állandóan használjuk.

OROSZ L. Kvantummechanika 48.oldal

1.2.6. A klasszikus mechanika és a kvantummechanika kapcsolata

1.2.6.1. Az Ehrenfest tétel

Az eddigiekben a megméréendő elektron φ állapota nem függött az időtől. Most a $\Psi(t)$ időfüggő állapotban történő mérést fogjuk megvizsgálni. Mivel az elektron állapota állandóan változik így a dinamikai tulajdonságai is pillanatról pillanatra változni fognak. Szó sem lehet tehát arról, hogy egy dinamikai változó mérését (ami sok elemi mérést jelent) egy elektronon egy adott időpontban elvégezhesük. Ennek ellenére a továbbiakban is mindig az "egy részecske - sok elemi mérés" szemléletet fogjuk használni az elméleti számításainkban. De tudnunk kell azt, hogy a mérések szempontjából ez valójában mit is jelent.

Legyen az elektronunk a $\Psi(\vec{r}, t)$ időfüggő állapotban. Ekkor az A dinamikai változó mérésének a várható értéke is fog függni az időtől. Ezt az időfüggést az átlagérték idő szerinti első deriváltja (a változás sebessége) jellemzi. A várható érték a 4. axióma alapján kiszámítható, az állapot időfüggését az 5. axióma határozza meg. Eredményül az adódott, hogy az A dinamikai változó várható értékének a változási sebessége, a \hat{H} energiaoperátor és az \hat{A} operátor kommutátorától függ:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\Psi(t)} = \frac{j}{\hbar} \langle \Psi | [\hat{H}, \hat{A}] | \Psi \rangle$$

Ez az általános Ehrenfest tétel.

OROSZ L. Kvantummechanika 49.oldal

1.2.6.2. A klasszikus mechanika mozgásegyenlete

Az Ehrenfest tétel alkalmazásaként elsőnek vizsgáljuk meg az impulzus várható értékének az időbeli változását. A tételt alkalmazva az adódik, hogy az impulzus várható értékének idő szerinti első deriváltja a potenciális energia negatív gradiensének az átlagával egyenlő:

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = \langle \Psi \left| \left(-\frac{\partial V}{\partial x} \right) \right| \Psi \rangle$$

A kapott eredmény fizikai értelmezésekor két esetet kell megvizsgálnunk.

Először tekintsünk azt amikor az elektron potenciális energiája nagyon nagyot változik abban a térrészben ahol az elektron nagy valószínűséggel megtalálható. Ez a helyzet pl. atomokba kötött elektronoknál. Ekkor az impulzusátlag időderiváltjának a kiszámításához szükség van a hullámfüggvény ismeretére is. Ez pedig csak a kvantummechanika alkalmazásával kapható meg.

A másik esetben a potenciális energia térbeli változása elhanyagolhatóan kicsi abban a térrészben, ahol az elektron egy adott időpillanatban nagy valószínűséggel van. Ez a helyzet lép fel, amikor az elektront makroszkopikus tartományban változó elektromágneses térbe helyezzük (pl. egy kondenzátorba). Ekkor a potenciális energia gyakorlatilag állandónak tekinthető az elektron "helyén". A kvantummechanikai átlagképzés során a hullámfüggvény az összefüggéseinkből eltűnik:

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle \approx \left[-\frac{\partial V}{\partial x} \right]_{\langle x \rangle}$$

Tehát a mozgástörvényt a kvantummechanika használata nélkül is meg tudjuk fogalmazni, azaz eljutottunk a klasszikus mechanikához. Látható tehát, hogy Newton második axiómáját le tudtuk vezetni a kvantummechanikából. Tehát a kvantummechanika magában foglalja a klasszikus mechanikát, azaz (ahogy annak lennie is kell!) a korrespondencia elv teljesül.

OROSZ L. Kvantummechanika 50. oldal

Most már válaszolhatunk arra a kérdésre is, hogy hogyan alakult ki a klasszikus tömegpont fogalmunk. Egy makroszkopikus méretű objektum mérése során a klasszikus mérőműszerünkben egy időpontban (ami a mikroszkopikus skálán mindig egy véges időtartam) nagyon nagy számú kvantummechanikai elemi mérés zajlik le. Ennek az átlagát jelzi ki a műszerünk mint a klasszikus mérés eredményét. A határozatlansági relációt nem érzékeljük, hiszen a szórások bőven belesznek a klasszikus mérőműszer pontatlansági tartományába. Azaz a klasszikus mechanikai mérések szerint egy részecske egy adott "időpillanatban" a tér egy adott "pontjában" lesz és adott impulzussal fog rendelkezni. Ennek alapján alkottuk meg a részecskék tömegpont modelljét.

Második példaként vizsgáljuk meg a helykoordináta átlagának az időbeli változását! Az Ehrenfest tétel eredményeként tulajdonképpen a sebesség kvantummechanikai definíciójához jutottunk:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p_x \rangle$$

Az eddigiekből már leszűrhető az az általánosságban is igaznak bizonyuló következtetésünk, mely szerint a kvantummechanikai átlagok között éppen a klasszikus mechanika összefüggései állnak fenn. Ez tulajdonképpen az általános Ehrenfest tétel verbális megfogalmazása. Így részletes számítások nélkül is felírhatjuk például a munka-tétel Ehrenfest szerinti alakját. Ez a szilárdtest-fizikában nagyon fontos szerephez jut majd.

OROSZ L. Kvantummechanika 51. oldal

1.2.6.3. Az energia és az idő közötti határozatlansági reláció

Az "idő" fogalmunk talán a legérdekesebb és bölcséleti szempontból a legizgalmasabb fogalmaink közé tartozik. A "Mi az idő?" kérdésre bizony nehezen tudnánk kapásból válaszolni.

A születésünk után átélt sok szubjektív élmény hatása következtében, lassan érlelődött bennünk az idő szubjektív érzete, majd ennek kapcsán a fogalma. Kisgyermek korunkban a tér-fogalmunk hamarabb alakult ki, mint az idő. Előbb értettük meg azt, hogy mit is jelent az "itt" és az "ott", mint a "most" és a "majd". "Hányat kell még aludni Karácsonyig?" kérdeztük. "Addig kell itt ülnöd, amíg a nagymutató legfelülre nem érkezik!" mondták a felnőttek. Mindkét esetben az "időről" illetve annak "múlásáról" volt szó. Emlékeztünk csak vissza arra, hogy mikor tanultuk meg azt, hogy "mennyi időt mutat az óra"! Ez kb. 8-9 éves korunkra tehető. A hosszú évek során kialakult szubjektív időérzetünk igen csalóka. Egy fogorvosi székben ülve a percek is óráknak

tűnnek, a szeretteink körében szinte “repülnek az évek”. Az absztrakt idő fogalmunk kialakulása még csak ezek után következett.

Mi tehát az idő? Pusztán csak egy szubjektív fogalom, vagy tőlünk függetlenül létező “valami”. Vajon az Univerzumban is “telik az idő?” A Nagy Bumm “előtt is létezett az idő?” vagy az is “csak akkor keletkezett, mint amikor az Univerzum maga?”. A kozmológia modern elmélete próbál válaszolni ezekre e kérdésekre (is). A természettudomány (jelesen a fizika) válaszait azonban a “szubjektív időérzettel terhelt elménkkel” kell értelmeznünk és ez egyáltalán nem egyszerű. Nem véletlen, hogy minden filozófiai és vallási rendszer sarkalatos pontja az “időhöz, mint olyanhoz” fűződő viszonya. Gondolhatunk a “lélekvándorlás” ciklikus időfogalmára, vagy a kereszténység lineáris időszemléleten alapuló tanaira, amely szerint az “Örökkévaló” az “örök élettel” kecségteti vagy riasztja a mulandó embert. “Mi tehát az idő?” Érvényes-e itt is az ismert paradoxon: “Használni jól tudom, de megmagyarázni nem!”. Einstein ezt így fogalmazta meg:

“Tudjuk, hogy mi az óra és mi a méter, nem tudjuk azonban, hogy mi az idő és mi a tér.”

Emlékezetünkbe idézhetjük Madách Imre szavait az időről és annak múlásáról:

“Minden mi él az egyenlő soká él,
A százados fa, s egynapos rovar.
Eszmél, örül, szeret és elbukik,
Mídön napszámát s vágyait betölté.
Nem az idő halad: mi változunk,
Egy század, egy nap szinte egyre megy.
.....”

Ezen kis, lírai kitérő után, térjünk vissza a kvantummechanikához!

Ismereteink már elegendőek ahhoz, hogy a kvantummechanika egyik leginkább félreérthető és ezért legtöbbször valóban félre is értett tételét precízen megfogalmazzuk.

Tekintsünk egy $\Psi(\vec{r}, t)$ időfüggő állapotban lévő elektront és merjük meg egy *adott időpontban* az energiáját és egy másik \mathbf{A} dinamikai változóját is! Az *adott pillanatban* a mérés eredménye két hisztogram lesz, értelemszerűen az egyik az energiára, a másik az \mathbf{A} dinamikai változóra vonatkozik. Mivel az elektron állapota időben változik, így a mérés eredményét szemléltető hisztogramok is pillanatról pillanatra változni fognak. Az Ehrenfest tétel segítségével kiszámítható a várható(átlag)értékek változási sebessége.

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle = \frac{j}{\hbar} \langle \Psi | [\hat{H}, \hat{A}] | \Psi \rangle.$$

A Heisenberg féle határozatlansági reláció pedig megadja a szórások közötti kapcsolatot.

$$\Delta A \cdot \Delta E \geq \frac{1}{2} \left| \langle \Psi | [\hat{H}, \hat{A}] | \Psi \rangle \right|.$$

Vezessünk be egy Δt mennyiséget (karakterisztikus időtartamot), amelyik a rendszerben lezajló időbeli változásokat jellemzi, az alábbi definíció szerint:

$$\Delta A = \frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle \cdot \Delta t$$

Azért, hogy jobban megértsük ennek a szükségességét tegyünk ismét egy kis filozófálgató kitérőt:

Az "időt", mint olyat mérni nem tudjuk. Mérni csak valamilyen dinamikai mennyiséget (változót) tudunk. A dinamikai mennyiségek megváltozása kelti bennünk az "idő múlásának" a képzetét. Minden, a Természetben meglévő, vagy az ember által konstruált óra "működésének" is ez az alapelve (pl.: a Hold sarlója megváltozik, a Nap felkel és lenyugszik, a homokszemek leperegnek, az óramutató elmozdul, a kvarckristály alakja eltorzul, az elektromágneses térerősség megváltozik, stb.) Ha a változások a testünket felépítő sejtek fiziológiai tulajdonságait jellemzik, akkor az "idő múlását" bizony már saját bőrünkön is tapasztalhatjuk. (“*Nem az idő halad: mi változunk...*”) Ezért alakult ki bennünk az az érzés, mintha az "idő" mint olyan **önállóan létező, abszolút valami lenne**. Ezt a képzetet az einsteini relativitáselmélet már meg kellett, hogy rendítse bennünk (egyidejűség, idődilatació, ikerparadoxon) .A kvantummechanika remélhetőleg a maradék illúziókat is eloszlatja majd. Ez persze nem megy könnyen! Beidegzett gondolkodásmódunkhoz, megszokott szemléletünkhöz sokszor irracionális makaességgel ragaszkodunk. Néha "jobban hiszünk a szemünknek, mint az eszünknek”. Minden esetre mindez vitára készlet! Mint azt a bevezetőben elmondottak is sugallhatják, az időről,

mint olyanról folytatott vitáink és elmélkedéseink nagyon messzire vezethetnek. Fontos filozófiai kategóriáról van szó, amellyel kapcsolatos gondolataink a tiszta racionalitástól, a bennünk szunnyadó miszticizmus gyökeréig ívelhetnek. Mindez azonban nem tartozik e tantárgy keretei közé.

Ott tartottunk tehát, hogy bevezettük a Δt mennyiséget. Ennek fizikai jelentése igen szemléletes. A Δt az az időtartam, ami alatt az A dinamikai változó átlaga éppen egy szórásnyit változik. Ez tehát egy olyan karakterisztikus, mérhető időtartam, amellyel a $\Psi(t)$ időbeli változását jellemezhetjük. Az állapotfüggvény ugyanis közvetlenül nem(!) mérhető, így annak időbeli megváltozása sem. Az előzőekben elmondottak szerint tehát az A dinamikai változó az óra szerepét tölti be. Ha a Δt kicsi, akkor ez azt jelenti, hogy az elektron az állapotát gyorsan változtatja. Ha a Δt nagy, akkor ez a változás lassú. Ezek után a fenti egyenletek kombinációjából egy igen fontos és érdekes összefüggésre juthatunk, nevezetesen:

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

Láthatóan a számolásunk eredményeképp egy határozatlansági relációt kapunk a Δt karakterisztikus időtartam és az energia ΔE szórása között.

Az elmondottak szemléltetésére nézzünk egy példát. Tekintsük a Hidrogén atom energiaszintjeit. Az alapállapotban az elektron végtelen hosszú ideig tartózkodhat ($\Delta t \rightarrow \infty$) ezért az alapállapot energiája egy pontos érték ($\Delta E \rightarrow 0$). Ha az elektron egy magasabb energiaszintre kerül, akkor egy idő múlva visszaugrik az alapállapotba, azaz az állapota megváltozott ($\Delta t =$ véges). Ezért a gerjesztett állapot energiája nem egy pontos érték, hanem véges szórással rendelkezik ($\Delta E =$ véges). A legerjesztődéskor kisugárzott energia sem lesz egy meghatározott érték, és ez elmondható a kisugárzott foton frekvenciájáról is. Azt mérjük, hogy az atom által kisugárzott fotonok frekvenciája nem egy meghatározott érték, hanem egy keskeny frekvenciatartományba esik, amelynek a "szélességét" $\Delta E \equiv \hbar \cdot \Delta \nu$ összefüggéssel definiáljuk. Azt mondjuk erre, hogy a spektrumvonal elmosódik, kiszélesedik. Ezt a spektroszkópiában tapasztalt jelenséget a spektrumvonalak ún. "természetes vonalszélességének" nevezzük.

* * * * *

Ezzel befejeztük a kvantummechanikával kapcsolatos általános vizsgálódásainkat. Megtanultuk az alaptörvényeket (axiómákat) és a belőlük fakadó azon következtetéseket, amelyek már elegendőek ahhoz, hogy megértsük a kvantummechanikai gondolkodásmód lényegét. Az egyéni szemléletet azonban mindenkinek magának kell kialakítania önmagában. Természetesen még nagyon sok igen érdekes részlet van, amiről nem hallottunk. Ez azonban már nem tartozik azon ismeretek közé, amelyek feltétlenül elvárhatók lennének egy mérnöktől.

Ezek után az eddigiek alkalmazásával fogunk foglalkozni. A végső célunk azon mikrofizikai folyamatok alapelveinek a megértése, amelyek az elektronikus eszközökben lezajlanak.

Előtte azonban még kell értenünk azt, hogy egyetlen atom hogyan épül fel és hogyan "működik".

1.3. A perdület és a mágneses momentum

1.3.1. A pályaperdület

Eddig a koordináta, az impulzus és az energia voltak azok a dinamikai változók, amelyek kvantummechanikai tulajdonságaival megismerkedtünk. Most egy újabb dinamikai változót, a pályamozgásból adódó perdületet fogjuk vizsgálni. A módszer a már megszokott lesz:

"Klasszikus mechanika → Operátorok → Sajátérték egyenlet → Fizikai értelmezés → Mérés "

Egy tömegpontnak egy adott pontra (legyen ez az origó) vett $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ perdülete vektor mennyiség. Ezért három skalár adattal, pl.: az (L_x, L_y, L_z) három Descartes komponenssel jellemezhető. A 2. axióma szabályai szerint a megfelelő operátorok könnyen képezhetőek. Tekintsük az \hat{L}_z operátort! Bizonyítható, hogy gömbi

koordináta rendszerben ez az operátor a φ szög szerinti első deriválttal arányos: $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial \varphi}$. Ez fizikailag

szemléletesen is értelmezhető. Gondoljunk csak arra, hogy pl. az x-irányú mozgásból adódó p_x impulzushoz rendelt operátor az x-szerinti deriválttal arányos, és ugyanez igaz az y és a z komponensekre is. Gömbi koordinátarendszerben L_z perdület csak a φ változásából adódó mozgásból adódik. Így joggal várjuk, hogy az L_z perdülethez rendelt operátor a φ szög szerinti deriválással legyen arányos.

Az $\hat{L}_z \Phi = L_z \cdot \Phi$ sajátérték egyenlet matematikai megoldásai egyszerűen meghatározhatóak. Ezek közül a regularitási feltételek választják ki a fizikai megoldásokat (1. axióma). A $\Phi(\varphi)$ sajátfüggvény egyértékű, ha $\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$. Ez csak akkor teljesül, ha az L_z sajátérték a \hbar egész számú többszöröse, azaz $L_z = m_l \hbar$, ahol $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Tehát az L_z sajátértéke kvantált

1.3.2. A (zárt) pályamozgás mágneses momentuma

Ha egy pontszerű elektron zárt pályán mozog (pl. a Bohr-féle atommodellben) akkor ez a mozgó elektromos töltés mágneses teret kelt. Ez a tér egy mágneses dipólus terével jellemezhető. Ez a mágneses dipólus egy újabb dinamikai változó. Vizsgáljuk meg ennek a kvantummechanikai tulajdonságait!

Az egyszerűség végett egy "r" sugarú körpályán mozgó elektron esetét fogjuk vizsgálni. A klasszikus fizika szerint, a pályamozgás során az elektron "m" tömegéből adódó \vec{L} perdülete és az "e" elektromos töltéséből származó \vec{M}_L mágneses momentuma között szoros kapcsolat van. A perdületet már az előzőekben részletesen tárgyaltuk. A körpályán mozgó elektron egy kis áramhurkot jelent. Így a mágneses momentuma a már tanult módon ("áramerősség x felület") egyszerűen számítható: $M_L = I \cdot r^2 \pi$. Ezt összehasonlítva az L perdülettel eredményül az adódik, hogy a mágneses momentum vektor a pályaperdület vektorral arányos:

$\vec{M}_L = -\frac{e}{2m} \vec{L}$. Az arányossági tényező láthatóan univerzális állandókból áll, úgymint az elemi töltés és az elektron tömege.

A mágneses momentum vektor Descartes komponenseihez rendelt operátorok a perdület operátor ismeretében a 2. axióma szerint képezhetőek. Tekintsük a z komponenshez rendelt \hat{M}_{Lz} operátort. Ez az \hat{L}_z operátortól csak egy konstans szorzóban különbözik. Ezért a 38. oldalon tanultak értelmében a két operátornak közösek a sajátfüggvényei és az operátorok közötti kapcsolatot a sajátértékek öröklik. Az adódik tehát, hogy az M_z mágneses momentum komponens kvantált. Azaz $M_{Lz} = m_l \mu_B$ ahol $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ és érthető okokból mágneses kvantumszámnak hívjuk. A mágneses momentum kvantumát a μ_B -t, Bohr-féle "magneton"-nak nevezzük és univerzális fizikai állandókból áll (beleértve a kvantummechanikára jellemző \hbar -t

is). A magneton szót a foton szó mintájára képeztük. (Általában egy jelenség elemi kvantumait az illető fizikai jelenség nevéből képezzük. Így születtek meg a: foton, magneton, fonon, magnon, exciton, polaron,... stb ... szavak, amelyeket a szilárdtest-fizikában használunk. Ezek közül mi csak az első hárommal fogunk e tárgy keretében találkozni.).

OROSZ L. Kvantummechanika 54.oldal

1.3.3. Mozgás centrális erőterben

1.3.3.1. A pályaperdület meghatározása

Eddigi tárgyalásunkban a körpályán mozgó elektront kinematikailag adottnak vettük. Nem vizsgáltuk azt, hogy mik a létrejöttének a dinamikai feltételei. Ez pedig fontos, hiszen a valóságban egy elektron mozgásállapotát a környezetében lévő más testekkel való kölcsönhatásai határozzák meg. Csak az a mozgás létezik, amelyet valamilyen erőhatás létrehoz. Mindig kell, hogy a kinematikának legyen dinamikai háttere is. A tárgyalásunk most is, mint mindig a szokásos sémán alapul:

"Klasszikus mechanika → Operátorok → Sajátérték egyenlet → Fizikai értelmezés → Mérés "

Először a klasszikus mechanikában tanultakat foglaljuk össze. Centrális erőter esetén az erő mindig egy pont felé (erőcentrum felé) irányul. Nagysága legyen arányos az "r" sugárral, azaz a centrumtól mért távolsággal. Ezen erőterben egy r-től függő skalár potenciál definiálható, amelynek az ekvipotenciális felületei gömbök. Az erőterben mozgó tömegpont tehát egy $V(r)$ potenciális energiával rendelkezik. Egy elektromos ponttöltés is egy centrális erőteret hoz maga körül létre (Coulomb törvény).

Centrális erő hatására mozgó tömegpont \vec{L} perdülete és az E összenergiája állandó. Mivel a pont sebessége mindig merőleges a perdület vektorra, így ha \vec{L} iránya állandó, akkor a mozgás az erre merőleges síkban történik. Centrális erőterben mozgó tömegpont tehát síkmozgást végez. Ezért a mozgás leírására célszerű a mozgás síkjában felvett polárkoordináta-rendszert választani. Centrális erőter lévén a tömegpont potenciális energiája csak az r sugártól függ. A $H(\vec{r}, \vec{p})$ összenergia kifejezése (a Hamilton függvény) definíció szerint a kinetikus és a potenciális energia összegéből áll. A kinetikus energia a sugárirányú mozgásból (\vec{p}_r) és a sugárra merőleges (\vec{p}_θ) mozgásból adódó kinetikus energiák összegeként írható fel. A sugárra merőleges mozgás energiája pedig az állandó nagyságú perdülettel fejezhető ki, és csak az "r" függvénye lesz:

lesz: $\frac{p_\theta^2}{2m} = \frac{L^2}{2mr^2}$. Ezért ez egy potenciális energiaként fogható fel. Az elnevezés jogosságának a fizikai

háttere a következőkből érthető meg. Vizsgáljuk a tömegpont mozgását egy, a centrumot a tömegponttal összekötő egyeneshez rögzített, forgó vonatkoztatási rendszerben. Ekkor, ebben a koordináta rendszerben, a forgó mozgás következtében, tehetetlenségi erők is fellépnek. A tömegpont helyzetét ekkor az "r" távolság egyértelműen meghatározza, tehát a mozgása most egydimenziós lesz. A fellépő tehetetlenségi erőből adódó potenciális energiát "centrifugális potenciálnak" hívjuk. (A továbbiakba is gyakran használjuk a potenciális energia helyett a rövidebb potenciál kifejezést. Ha tudjuk azt, hogy fizikailag miről van szó, akkor **ez a pongyolaság megengedhető!**) Nos pontosan ez az a potenciális energia, amelyet a perdület a fentebb leírt módon meghatároz. Tehát a tömegpont összenergiája a sugárirányú mozgásból adódó kinetikus és csak a

sugártól függő ún. effektív potenciál(is energia) összege. A $V_{eff}(r)$ effektív potenciál pedig a $V_{cf}(r) = \frac{L^2}{2mr^2}$

centrifugális és a $V(r)$ centrális potenciál összege.

Az energia-megmaradás tétele miatt csak azok a pályák jöhetnek létre amelyek esetén a $H(\vec{r}, \vec{p}) = E$ egyenlet teljesül.

A mint láttuk, centrifugális potenciál pozitív, L^2 -től és $1/r^2$ -től függ. A vonzó Coulomb potenciál negatív és $1/r$ -től függ.

Ismeretes, hogy $V = -\frac{\alpha}{r}$ -es vonzó potenciál esetén kúpszelet pályák adódnak. Az effektív potenciál

ismeretében a különböző típusú pályák a $H(\vec{r}, \vec{p}) = E$ feltétel alapján energetikailag azonosíthatók. A kötött állapotot megvalósító zárt pályák (kör és ellipszis) összenergiája negatív. A nem kötött állapotot jelentő nyílt pályák (parabola és hiperbola) összenergiája nem negatív érték.

Két fontos egyenlőtlenséget lehet felírni.

Az egyik szerint az azonos perdületű pályák közül a körpálya energiája a legkisebb.

A másik szerint az azonos energiájú pályák közül a körpálya perdülete a legnagyobb.

Ezek után rátérhetünk a kvantummechanikai tárgyalásra.

Láttuk azt, hogy a centrális erőterben lévő részecske mozgása legegyszerűbben polárkoordináta-rendszerben írható le. A \hat{H} Hamilton operátort ezért most polárkoordinátákkal fogjuk megadni. Az eredményhez kétféle módon juthatunk el. Az egyik esetben felírjuk a klasszikus Hamilton függvényt polárkoordináta-rendszerben, majd a 2. axióma szerint megadjuk a Hamilton operátort. A másik módszer az, hogy megadjuk a Hamilton operátort Descartes koordinátákkal majd ezt az operátort átírjuk polárkoordinátás alakba. A feladat tulajdonképpen a Laplace operátor polárkoordinátákba való felírására redukálódik. Ez pedig matematikai kézikönyvekben megtalálható. Mindkét módon ugyanarra az eredményre kell jutnunk. Azaz ugyanannak az operátornak kétféle formában felírt alakját kapjuk. A két Hamilton operátor összehasonlításával a sugárirányú mozgás kinetikus energiájának az operátora és \hat{L}^2 a perdület négyzetének az operátora kapható meg. Látható ugyanis, hogy a Laplace operátornak jól felismerhető struktúrája (felépítése) van, azaz sugártól és szögektől "függő" részekből áll: $\Delta_{r,\vartheta,\varphi} = \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\vartheta,\varphi}$. Ennek alapján a perdület négyzetének az operátorára

az adódik, hogy: $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\vartheta,\varphi}$. Látható, hogy ez magába foglalja a "z" irányú komponens négyzetének az \hat{L}_z^2 operátorát is.

A megfelelő sajátértékegyenletek tehát a következők:

$$\hat{H}\Psi(r, \vartheta, \varphi) = E \cdot \Psi(r, \vartheta, \varphi)$$

$$\hat{L}^2 Y(\vartheta, \varphi) = L^2 \cdot Y(\vartheta, \varphi)$$

$$\hat{L}_z \Phi(\varphi) = L_z \cdot \Phi(\varphi)$$

Ránézésre látható, hogy a \hat{H} Hamilton operátor, az \hat{L}^2 perdület operátor és az \hat{L}_z perdület komponens operátor egymással páronként felcserélhető. A 38. oldalon tanultak szerint a három operátornak közös sajátfüggvény-rendszere van. Mivel az operátorok különböző változókra hatnak, ezért a közös sajátfüggvény a különböző változójú függvények szorzata lesz. Ezek szerint van az elektronnak olyan $\Psi(r, \vartheta, \varphi)$ állapota, amelyben az E összenergiája, az L^2 perdülete és L_z a perdület z irányú komponense adott pontos érték, azaz:

$$\hat{H}\Psi = E \cdot \Psi$$

$$\hat{L}^2 \Psi = L^2 \cdot \Psi$$

$$\hat{L}_z \Psi = L_z \cdot \Psi$$

A továbbiakban ezeket az állapotokat fogjuk megkeresni.

Az \hat{L}_z perdület komponens sajátérték egyenletét már megoldottuk (52.oldal).

Az \hat{L}^2 perdület operátor sajátérték egyenlete szeparálással oldható meg .

Az $Y(\vartheta, \varphi)$ sajátfüggvény a $\Theta(\vartheta)$ és a $\Phi(\varphi)$ függvények szorzataként írható fel. A szeparálást a tanult módon hajtjuk végre (10 és 19. oldal). Közben kihasználjuk azt, hogy $\hat{L}_z \Phi(\varphi) = \hbar m_l \cdot \Phi(\varphi)$, azaz a $\Phi(\varphi)$ függvény az \hat{L}_z operátor sajátfüggvénye adott sajátérték mellett. Végül is a $\Theta(\vartheta)$ függvényre egy (az “ m_l ”-t, mint paramétert tartalmazó) másodrendű differenciálegyenlet adódik, amelyik polinom módszerrel megoldható. A reguláris megoldások az ún. (asszociált) Legendre [kiejtése: “lözsandr”] polinomok melyeknek a változója most a $\cos(\vartheta)$, és így erre a $\Theta(\vartheta) = P_l^{|m_l|}(\cos \vartheta)$ jelölést vezetjük be.

Az L^2 sajátértéket egy új kvantumszám (az ún. mellék kvantumszám) az “ l ” határozza meg: $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$, és ezért $L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$. A mellék-kvantumszám lehetséges értékei $l = 0, 1, 2, \dots$ egész számok. A reguláris (polinom) megoldás feltétele az is, hogy az egyenletben lévő mágneses kvantumszám abszolút értékének a maximális értéke “ l ” legyen. Tehát a mágneses kvantumszám lehetséges értékei $m_l = 0 \pm 1 \pm 2 \pm 3 \pm \dots \pm l$. Ennek a fizikai tartalma igen szemléletes, azaz a perdület vektor “ z ” komponense nem lehet nagyobb, mint a vektor hossza.

A szögektől függő $Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi) = P_l^{|m_l|}(\cos \vartheta) \cdot e^{jm_l \varphi}$ függvényt “gömbfüggvénynek” hívjuk. Az elnevezés oka a következő. Mint az ismeretes, a gömbfelület egy pontját egy (ϑ, φ) szög párral tudjuk kijelölni (ezt használjuk a földi helymeghatározáskor is). Így az $Y(\vartheta, \varphi)$ függvény a gömbfelület egy pontjához egy komplex számot rendel.

A perdületvektor Descartes komponenseihez rendelt $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ operátorok nem cserélhetők fel egymással. A Heisenberg féle határozatlansági reláció szerint ez azt jelenti, hogy nincsen olyan elektronállapot amelyben mindhárom komponensnek pontos értéke van. Mindebből következik, hogy a fent meghatározott $\Psi(r, \vartheta, \varphi)$ állapotban az L_z értéke egy adott érték, és így L_x és L_y értéke teljesen határozatlan lesz. Ezért nem kell foglalkoznunk ezzel két komponenssel.

Centrális erőterben mozgó elektron \vec{L} perdületvektorának a kvantálása egy vektorábrával szemléltethető. Csak olyan elektronállapotok léteznek, amelyben a perdület L nagysága és a “ z ” irányú komponense L_z határozott érték, de az x és y komponensek teljesen határozatlanok.

Adott “ l ” mellék-kvantumszám meghatározza a perdületvektor nagyságát: $L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$. A mágneses kvantumszám $m_l = 0 \pm 1 \pm 2 \pm 3 \pm \dots \pm l$ értékei pedig megadják a perdület “ z ” irányú vetületét: $L_z = \hbar m_l$. Az l és m_l közötti kapcsolat fizikai tartalma tehát az, hogy egy vektor bármelyik komponense nem lehet nagyobb mint a vektor hossza. Látható az is, hogy fennáll az $L_z < L$ reláció, azaz a perdületvektor soha nem lehet függőleges. Ez összhangban van a vízszintes komponensek közötti határozatlansági relációval.

Teljesen hasonló eredmények adódnak a pályamozgásból adódó mágneses momentumra is. Ennek nyilvánvaló oka az, hogy a perdület és a mágneses momentum csak egy konstans szorzótényezőben térnek el egymástól.

1.3.3.2. A sugárirányú (radiális) mozgás leírása

Centrális erőterben mozgó elektron energiája kötött állapotban negatív. A kvantált energiaszintek meghatározása $\hat{H}\Psi = E \cdot \Psi$ a Schrödinger egyenletnek (a Hamilton operátor sajátérték egyenletének) a megoldását jelenti. A $\Psi(\vec{r}, t) = R(r) \cdot Y(\vartheta, \varphi)$ állapotfüggvény szeparálható. A szögektől függő részét az $Y(\vartheta, \varphi)$ gömbfüggvényeket már meghatároztuk. Ez tehát minden centrális potenciálnál ugyanolyan. A $V(r)$ potenciális energia csak a sugártól függő $R(r)$ függvényt meghatározó differenciálegyenletben jelenik meg. Ebben az egyenletben célszerű bevezetni a már jól ismert $V_{eff}(r)$ effektív potenciális energiát.

OROSZ L. Kvantummechanika 59. oldal

A sugárirányú mozgás kinetikus energiájának az operátora, a $\frac{\hat{p}_r^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r$, elsőrendű deriváltakat

is tartalmaz. Így az $R(r)$ függvényt meghatározó differenciálegyenlet formailag nem egészen olyan, mint a már jól ismert egydimenziós Schrödinger egyenlet. Egy egyszerű transzformációval azonban ez a "hiányosság" kiküszöbölhető. Vezessük be ugyanis a $R(r)$ helyett a $P(r) = rR(r)$ függvényt. Ekkor $P(r)$ függvényre már csak a sugár szerinti második deriváltat tartalmazó, formailag is a megszokott, egydimenziós Schrödinger egyenlet adódik. A sajátérték egyenletben az (egydimenziós) effektív potenciál szerepel.

Ezt az egyenletet az L perdület és a $V(r)$ potenciális energia ismeretében már meg tudnánk oldani. Azonban a diszkrét energiaszintekhez tartozó $P(r)$ egydimenziós sajátfüggvények alakját a 14-15 oldalakon tanultak szerint, a konkrét matematikai számítások nélkül is meg lehet jósolni.

OROSZ L. Kvantummechanika 60. oldal

A $P(r)$ egy "valódi" egydimenziós Schrödinger egyenlet sajátfüggvénye és igen szemléletes fizikai jelentéssel rendelkezik.

A teljes hullámfüggvénnyel felírt $|\Psi(r, \vartheta, \varphi)|^2 dV$ kifejezés megadja az elektron megtalálási valószínűségét az \mathbf{r} pont dV környezetében. Számoljuk ki a tartózkodási valószínűséget, ha a dV térfogat egy r sugarú és dr vastagságú gömbhéj. Ez azt jelenti, hogy a tartózkodási valószínűség sűrűség szögektől függő részét összegezni kell a teljes gömbhéjra. Eredményül éppen a $|P(r)|^2 dr$ -et kapunk. Tehát a $P(r)$ függvény ismeretében meg tudjuk határozni annak a valószínűségét, hogy az elektront a centrumtól bármelyik irányban r távolságban találjuk meg.

1.3.3.3. A hidrogénszerű ion

Ha a centrális $V(r)$ potenciál helyébe a vonzó Coulomb potenciált írjuk, akkor általános esetben a hidrogénszerű ion kvantummechanikai modelljéhez jutunk. Azért "hidrogénszerű", mert egyetlen elektront tartalmaz és azért "ion", mert a pontszerűnek képelt pozitív magtöltés az elemi töltés többszöröse, pl. $+Ze$.

A teljes hullámfüggvény szögektől függő $Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi)$ része általánosan ismert. Így csak a sugártól függő $R(r)$ tényezőt kell meghatározni. Az effektív potenciál ismeretében a számítások elvégezhetők. A kapott egydimenziós Schrödinger egyenlet (ami egy sajátérték egyenlet) polinom módszerrel oldható meg.

A reguláris megoldások (a sajátfüggvények) ún. (asszociált) Laguerre [ejtése: "lager"] polinomok. A sajátértékek a kötött állapot lehetséges energiaszintjeit adják. A kvantált energiaszinteket egy újabb kvantumszámmal, az "n" főkvantum-számmal tudjuk kifejezni. Reguláris megoldások akkor adódnak, ha a mellék-kvantumszám kisebb, mint a főkvantum-szám, azaz $l=0, 1, 2, \dots, (n-1)$. Ennek a korlátozó összefüggésnek a fizikai tartalma a klasszikus fizikai tárgyalás során az 55. oldalon bemutatott egyik egyenlőtlenségi relációból adódik. Nevezetesen, adott energiájú (n) állapotok perdülete (l) felülről korlátozott.

Az eddigiek röviden az alábbiakban foglalhatók össze. A hidrogénszerű ionban a kötött elektron állapotfüggvényét három kvantumszám határozza meg (n, l, m_l) . Ezek ugyanakkor megadják az ebben az állapotban pontosan (nulla szórással) mérhető dinamikai változókat is. Úgy mint az $E(n)$ összenergiát, az $L(l)$ perdület nagyságát és $L_z(m_l)$ -t a "z" irányú perdület komponenset.

Mint azt a történeti bevezetőben láttuk, a Bohr modell a hidrogén atom energiaszintjeit jól adja meg (hiszen pontosan ebből a célból készült). A körpályán keringő pontszerű elektron képe azonban a kvantummechanikai szemlélet szerint teljesen hamis. Célszerű megvizsgálni azt, hogy milyen módon adja vissza a korrekt kvantummechanika a fél-klasszikus Bohr pályákat. Azaz hogyan teljesül ebben az esetben a megkívánt "korrespondencia" elv?

A Bohr modell esetén a diszkrét energiaszinteket a perdület Bohr-féle kvantálási törvénye határozza meg. Ezt grafikus módszerrel a következőképpen lehet szemléltetni. Felrajzoljuk a Bohr féle $(L = n \cdot \hbar)$ perdületkvantálásnak megfelelő effektív potenciál függvényeket $(n = 1, 2, 3, \dots)$. A körpálya feltétele az, hogy az E_n energiaszinteket jelentő egyenesek egy pontban (a minimumnál) érintsék az effektív potenciálokat ábrázoló görbéket. Az érintési pontok megadják a lehetséges körpályák r_n sugarait is.

A kvantummechanikai modell ennél jóval bonyolultabb. Ezért csak a Bohr modell szempontjából lényeges elemeit fogjuk figyelembe venni. Rajzoljuk fel itt is az effektív potenciálokat, de a perdületet a kvantummechanikai $L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$ kvantálásnak megfelelően adjuk meg $(l=0, 1, 2, \dots)$. Látható, hogy az effektív potenciálok "kissé" az E_n energiaszintek "alá lógnak". Így az $l=0$ esetet kivéve két metszéspont adódik. Az 55.oldalon tanultak szerint, az adott energiaszinthez tartozó körpályának mindig a maximális perdületű állapot felel meg. Az n -ik energiaszint esetén a maximális perdületet pedig a mellék-kvantumszám $l=n-1$ értéke határozza meg. Ez ugyanakkor azt is jelenti, hogy adott perdület esetén ebben az állapotban minimális az energia. Ezért ebben a (körpályának megfelelő) állapotban a sugártól függő $P(r)$ állapotfüggvénynek csak "egy púpja van". Tehát az elektron, jó közelítéssel, egy gömbhéjban lokalizálódik. A maximális megtalálási valószínűséghez tartozó gömbnek a sugara éppen a Bohr-féle körpálya sugarával egyezik meg. A Bohr modell tehát csak a maximális valószínűségeket "látja" és azt is csak egy síkban.

1.3.3.4. Az atomok elektronszerkezete

A hidrogénszerű ionnál tanultak azért fontosak, mert segítségével egy egyszerű általános atommodell alkotható, amely a periódusos-rendszer felépítésének a magyarázatául szolgál. Az egyedi atomok elektronszerkezetének pontosabb meghatározásához már bonyolultabb modellek szükségesek. Az elvekre még később visszatérünk.

Tételezzük fel, hogy az atomban lévő elektronok csak az atommag terét érzékelik, azaz az elektronok közötti kölcsönhatástól tekintünk el! Ekkor minden elektronállapot valamilyen hidrogénszerű ionállapot lesz. A kérdés az, hogy hány elektron veheti fel állapotot az atomban. Az atomi elektronállapotok betöltésénél két szabályt kell követnünk. Mindkettőt fogadjuk most el tapasztalati ténynek. Az egyik az ún. Pauli elv. Ez azt állítja, hogy egy atomban egy (n, l, m_l) kvantumszám hármassal jellemzett atompályán maximum két elektron lehet. Az elv mélyebb okairól és a pontos megfogalmazásáról a későbbiekben lesz szó. A másik az ún. Hund szabály, amely az állapotok betöltési sorrendjét határozza meg. A részletekre még az elektronspin bevezetése után visszatérünk.

Az atomok elektronszerkezetének a grafikus ábrázolására egy ún. blokk-diagramot fogunk használni. Minden "□"-al jelölt blokk egy atompályát reprezentál. Az atompályákhoz rendelt kvantumszámok értéke határozza meg a blokk relatív helyét az ábrában. Egy adott főkvantum-számhoz tartozó állapotok alkotják a "héjakat" (ezek a blokk-diagram sorai). Az azonos mellékkvantum-számú állapotok pedig ugyanazon "alhéjhoz" tartoznak (ezek a blokk-diagram oszlopai). Az $l=0, 1, 2, 3, 4, \dots$ alhéjakat s, p, d, f, g, \dots betűkkel is szoktuk jelölni. Mindezek a középiskolai tanulmányainkból már ismertek.

Mint már említettük, az elektronállapotok betöltési sorrendjét a Hund szabály rögzíti. Eszerint az állapotok betöltése alhéjanként történik. Az alhéjak sorrendjét pedig növekedő energiájuk határozza meg. Ha az elektronok közötti kölcsönhatást elhanyagoljuk, akkor az alhéjak energiáját csak a főkvantum-szám értéke határozza meg. Így az ugyanazon héjhoz tartozó alhéjak energiája megegyezik. Az elektronok közötti kölcsönhatás megváltoztatja az egyes alhéjak energiáját. Szemléletesen azt mondjuk, hogy az adott héjhoz tartozó energiaszint "felhasadt". A különböző héjakhoz tartozó alhéjak (felhasadt) energiaszintjei "összekeveredhetnek". (Például "3d" állapot energiája nagyobb lesz, mint a "4s" állapoté.) A felhasadt energiaszintek jól elkülönülő csoportokba rendeződnek.

Az egyes csoportosulásokhoz tartozó állapotok teljes betöltése az ún. nemesgázok elektronszerkezetét adja. Ezek meglehetősen stabil elektronszerkezetek, ami azt jelenti, hogy viszonylag nagy energia kell ahhoz, hogy egy elektront a lezárt héjból eltávozzon. Ezért a "nemes gázok" a szokásos körülmények között nem alkotnak vegyületeket. Egyatomos gáz formájában találkozunk velük.

Az alhéjak betöltési sorrendje (nagy részt) az ún. átlós diagramból határozható meg.

1.3.3.5. Az Állapotfüggvények (atompályák) grafikus ábrázolása

Az állapotfüggvények meghatározzák az elektron megtalálási valószínűségét az atommag körül a térben. Ezt szemléletesen "elektronfelhőnek" is szoktuk hívni. Ez az atomi elektronfelhő megadja az illető atom kémiai tulajdonságait. Ezért hasznos bevezetni egy olyan grafikus módszert, amely vizuálisan informál minket az elektronfelhő atomon belüli eloszlásáról.

Az állapotfüggvényt szeparált alakban határoztuk meg. Mivel az $R(r)$ sugártól függő rész nyilvánvalóan gömbszimmetrikus, így az elektronfelhő anizotrópiáját az $Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi)$ szögektől függő gömbfüggvények határozzák meg. Ezek ábrázolása ún. polár diagrammal történik. Ekkor felrajzoljuk azt az $Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi) = \text{állandó}$ felületet, amelyen belül az elektron közel egy valószínűséggel ("1-e") található meg.

Az s-állapot gömbszimmetrikus. Ábrázolása úgy történik, hogy megadjuk azt a gömböt, amelyen belül az elektron, pl.: 90 % valószínűséggel tartózkodik.

A p-állapotban a mellékkvantumszám $l = 1$ és a mágneses kvantumszám lehetséges értékei $m_l = -1, 0, +1$. Mint azt láttuk, ebben az állapotban az elektron perdülete $L = \hbar\sqrt{2}$ és a "z" irányú vetülete $L_z = -\hbar, 0, +\hbar$. Láttuk, hogy az $Y_1^{-1}(\vartheta, \varphi)$, $Y_1^{+1}(\vartheta, \varphi)$, $Y_1^0(\vartheta, \varphi)$ függvények ugyanahhoz a perdületértékhez tartoznak, tehát degenerált állapotok, így ezek bármilyen lineáris kombinációja szintén lehetséges sajátfüggvények lesznek. Ezért a komplex függvények helyett azok lineáris kombinációjával képzett valós függvényeket használunk az ábrázolásakor.

Azaz tehát:

$$Y_1^{-1}(\vartheta, \varphi) = \sin \vartheta \cdot e^{-j\varphi} \text{ helyett } \sin \vartheta \cdot \cos \varphi$$

$$Y_1^{+1}(\vartheta, \varphi) = \sin \vartheta \cdot e^{+j\varphi} \text{ helyett } \sin \vartheta \cdot \sin \varphi$$

$$Y_1^0(\vartheta, \varphi) = \cos \vartheta$$

A kapott valós függvények Descartes koordinátákkal is kifejezhetők:

$$Y_1^{-1}(\vartheta, \varphi) = \frac{x}{r}, \quad Y_1^0(\vartheta, \varphi) = \frac{z}{r}, \quad Y_1^{+1}(\vartheta, \varphi) = \frac{y}{r}.$$

Eredményül az adódott, hogy a p-állapotok mindegyike egy csomósíkkal rendelkezik, ezek rendre az $x=0$, $z=0$ és az $y=0$ síkok. Csomósíknak nevezzük ugyanis azt a síkot, amely mentén a hullámfüggvény zérus. A gömbszimmetrikus állapot a csomósík mentén mintegy "befűződik" és egy hengerszimmetrikus állapot jön létre.

A geometriai ábrázolás során egy "kettős szivar" alakzatot kell felrajzolnunk (rendre az x , z , y tengelyek mentén).

A hullámfüggvény (+, -) előjelét is be szoktuk írni a megfelelő tartományokba.

OROSZ L. Kvantummechanika 66. oldal

1.4. Atomok mágneses térben

1.4.1. A mágneses tér hatása a pályamozgásból származó mágneses momentumra

Az, hogy a kvantummechanika axiómarendszere jó-e vagy sem magából az axiómákból természetesen nem derül (nem derülhet) ki! Erre a kérdésre a választ csak az elméleti számítások eredményeinek kísérleti ellenőrzése adhatja meg. A hidrogén atom Bohr-féle modelljében az energiaszintek helyes voltát közvetve a Balmer formula segítségével bizonyítottuk. Más kísérleti eredmény az idő tájt nem is volt ismeretes, így nem derült ki az, hogy a perdület Bohr-féle kvantálási törvénye vajon önmagában helyes-e vagy sem? A gyanú akkor ébredhet fel bennünk, amikor kiderül, hogy a kvantummechanika a perdületre más kvantálási szabályt ad meg. Felmerül tehát a perdület megmérésének a szükségessége. Ehhez pedig kölcsönhatásba kell lépni a perdülettel. Ez a hozzá szorosan csatolódó mágneses momentumon keresztül történhet. Ugyanis, ha a mágneses momentumot mágneses térbe helyezük, akkor arra a tér valamilyen hatást fog gyakorolni. A következőkben evvel a hatással foglalkozunk.

Először megint a klasszikus fizikai modellt vizsgáljuk meg. Homogén \vec{B} mágneses térben lévő \vec{M}_L mágneses momentumra egy $\vec{M}_L \times \vec{B}$ forgatónyomaték hat. Mivel a mágneses momentumhoz egy \vec{L} perdületvektor csatolódik, a forgatónyomaték most a perdületre is hatni fog. A perdület megváltozásának a törvényét a newtoni mechanikából ismerjük. Eszerint a perdület pillanatnyi megváltozása a forgatónyomatékkal arányos. Mivel a (mágneses momentumra ható) forgatónyomaték merőleges a mágneses momentumra, így a perdület $d\vec{L}$ megváltozásának is merőlegesnek kell lenni magára a perdületre. A perdületnek tehát csak az iránya változik meg, a nagysága állandó marad. A perdületvektor ún. precessziós mozgást fog végezni, azaz a perdületvektor végpontja egyenletes ω_L szögsebességgel fog forogni a mágneses tér iránya körül. Ennek szögsebességnek a neve a Larmor-féle körfrekvencia. Nagysága univerzális állandókon kívül a mágneses tértől függ.

A kvantummechanikai tárgyalás során a homogén mágneses térbe helyezett atom Schrödinger egyenletét kell megoldanunk. Az egyszerűség kedvéért tekintsünk egy hidrogén atomot. A hidrogén atom valamely ψ_n állapotában az elektron a pályamozgásából adódó perdülettel és a hozzá csatolódó mágneses momentummal is rendelkezik. Ez a mágneses momentum a jelenlévő mágneses térrel kölcsönhatásba lép, amit a Schrödinger egyenletben egy potenciális energia(operátor) taggal kell figyelembe vennünk: $\hat{W}_m = -\hat{M}_z \cdot B = \omega_L \cdot \hat{L}_z$ (2. axióma).

OROSZ L. Kvantummechanika 67. oldal

Közvetlen behelyettesítéssel bizonyítható, hogy az elektron ψ_n állapotfüggvénye nem változik meg, ha a hidrogén atomot homogén mágneses térbe helyezük. Ennek az az oka, hogy \hat{W}_m a fellépő új potenciális energia tag operátora az \hat{L}_z operátorral arányos. Mivel az \hat{L}_z operátor felcserélhető a mágneses tér nélküli hidrogén atom \hat{H}_0 Hamilton operátorával, ezért a sajátfüggvényeknek meg kell egyezni. Az E_n energiaszintek azonban $\varepsilon_n = E_n + m_l \cdot \hbar \omega_L$ -re változnak. Ezt a megváltozást szemléletesen felhasadásnak nevezzük.

A pályaaállapotok energiaszintjeinek a felhasadása megváltoztatja a lehetséges elektronátmeneteket és így a kibocsátható fotonok lehetséges energiáit is. Ez pedig a spektrum vonalak felhasadását eredményezi, ami spektroszkópiai méréssel detektálható. A jelenséget Zeeman effektusnak nevezik. Helyesebben ennek a neve a "normális Zeeman effektus" (1896. Ekkor még csak a klasszikus Lorentz-féle pontszerű elektronmodell létezett. Ennek alapján is meg lehetett magyarázni ezt a jelenséget). A következő fejezetben látni fogjuk, hogy az elektronnak magának is van egy mágneses momentuma. Természetesen ez is kölcsönhatásba lép a külső homogén térrel. A kétféle eredetű, de azonos nagyságrendű mágneses momentumok hatása a valóságban együtt kell, hogy jelentkezzen. Ekkor beszélünk az "anomális Zeeman effektusról". Az ellentmondó elnevezésnek történeti okai vannak.

1.4.2. Az elektron saját mágneses momentuma és az elektronspin

Ez a tantárgy nem fizikatörténet! Ezért az egyes kísérleteket nem a megszületésük sorrendjében mutatjuk be. Mai, letisztult és egzakt ismereteink birtokában legrövidebb úton, a kísérlet és elmélet összekapcsolódásának logikus láncolata mentén szeretnénk eljutni az elektronspin fogalmához. A tudomány története azonban nem mindig olyan logikus, ahogyan azt mai didaktikai szemléletünk igényelné. Ezért a célunknak megfelelően „átrendezzük az eseményeket”. (Akár így is történhetett volna!)

Az atomok elektronszerkezetének a tárgyalásakor már láttuk azt, hogy az egyes alhéjak betöltése nem az egymást követő héjak sorrendjében, hanem attól eltérő módon történik. A betöltési sorrend ellenőrzése mérés útján lehetséges.

Tekintsük például a $Z=47$ rendszámú Ezüst atomot! A 46 elektron lezárt alhéjakban helyezkedik el. Azt kell mérésrel eldönteni, hogy a 47-ik elektron (4f), vagy (5s) állapotban van-e, azaz igaz-e a 63. oldalon bemutatott "átlós szabály"? A mérésre az ad lehetőséget, hogy a lezárt héjak pályamozgásból adódó eredő mágneses momentuma zérus kell, hogy legyen. Ennek oka az, hogy lezárt héj esetén az összes (+ és -) mágneses kvantumszámhoz tartozó pálya be van töltve, és így a mágneses momentumok kompenzálják egymást. Az ezüst atom eredő mágneses momentuma tehát csak a 47-ik elektron pályaaállapotából adódhat. Ez pedig más az (5s) és más a (4f) állapotban. Azaz ha megmérjük az ezüst atom mágneses momentumát, akkor ennek alapján a feltett kérdés egyértelműen megválaszolható.

OROSZ L. Kvantummechanika 68. oldal

Az atomok illetve molekulák mágneses momentumának a meghatározására az ún. "atom-" vagy "molekulasugaras mérés" használható. Ennek elve a következő. Ha inhomogén mágneses térbe egy mágneses momentumot (mágneses dipólust) helyezünk, akkor arra a forgatónyomatékon kívül egy erő is fog hatni, amelyik a (a mágneses tér irányától függően) a nagyobb vagy a kisebb térerősség irányába gyorsítja a mágneses momentumot. Ha tehát atomokból álló sugárnyalábot inhomogén mágneses térbe vezetünk, akkor a kezdetben együtt mozgó különböző irányú mágneses momentumok a rájuk ható különböző nagyságú erők hatására szétválnak. A beeső dipólus nyaláb így több ágra szakad. A becsapódások helye detektálható. Például, ha ezüst atomokból álló nyalábot használunk, akkor (4f) állapotú elektron esetén hét nyalábot ($m_l = 0 \pm 1 \pm 2$), (5s) állapot esetén egy nyalábot ($m_l = 0$) kellene kapnunk. Az érdekesség azonban az, hogy a bemenő ezüst atom nyaláb kettő(!) ágra válik szét. A nyalábokban a mágneses momentum mágneses térre vett vetületének (ez legyen a "z" irányú vetület) az értéke a mérések szerint $\pm \mu_B$ (Bohr magnetonnyi). Ez a meglepő kísérlet eredménye csak úgy magyarázható, ha feltesszük, hogy a 47-ik elektron (5s) pályaaállapotban van (így ennek a mágneses momentuma zérus) és maga az elektron is rendelkezik egy (saját, ún. "belső") mágneses momentummal, amelynek "z" irányú vetülete csak $\pm \mu_B$ lehet.

Magát, az imént vázolt molekulasugaras mérést 1920-ban Otto Stern a frankfurti egyetem magántanára dolgozta ki és a kísérleteit 1921-től W. Gerlach-al Rostockban folytatta. Ekkor még csak a Bohr-Sommerfeld atommodell létezett, ezért a mérések kiértékelése is csak ennek alapján történhetett. Mint tudjuk, e modell szerint a pályamozgás perdülete soha nem lehet zérus. Később a Schrödinger-féle elmélet megszületése után kiderült, hogy az elektron pályaperdületének legkisebb értéke valójában zérus ("s" állapot). Nyilvánvalóan ugyanezek érvényesek a pályamozgásból adódó mágneses momentumra is. A Stern-Gerlach féle (atom- illetve) molekulasugaras mérésekkel el lehetett dönteni azt, hogy melyik modellnek van igaza. A mérés eredménye utólag természetesen Schrödinger elméletét igazolta és (pl. a fentiekben tárgyalt ezüst atom esetén) elvezetett az elektron saját mágneses momentumának a felfedezéséhez is.

Az 1943-as fizikai Nobel díjat Otto Stern kapta, az indoklás szerint: "a molekulásugár-módszer kifejlesztéséért és a proton mágneses momentumának a felfedezéséért."

Ha az elektronnak van saját mágneses momentuma, akkor joggal tétélezhető fel, hogy van saját perdülete is. Ezt nevezzük spinnek. A bizonyítékot az a kísérlet szolgáltatja, amelyet Einstein javaslatára alapján W.J.deHaas német fizikus végzett el. (Ma ezt Einstei-de Haas kísérletnek nevezzük.)

Eredetileg, 1915-ben, azt akarták ellenőrizni, hogy a ferromágnesség Ampere-féle elméletében feltételezett elemi köráramok azonosíthatók-e az atomokban keringő elektronokkal. Mivel a mérés nem a várt eredményt adta, ezért a jelenséget mágneses anomáliának nevezték el. A magyarázatra csak jóval később, az elektron saját mágneses momentumának és a spinjének a bevezetése után került sor. Mi már ennek a tudatában ismertetjük a kísérletet.

A mérés lényege a következő. Áramjárta tekercs homogén mágneses terébe vékony torziós szárlra felfüggesztett vasrudat helyezünk. A fémbe lévő, a ferromágnességért felelős(?) elektronok saját mágneses momentumai "beállnak" a tér irányába. Változtassuk meg az áram irányát a tekercsben! Ekkor megváltozik a mágneses tér iránya is. Az elektronok mágneses momentumai követik a tér irányváltozását. Ha az elektronnak van saját perdülete, akkor azok is megfordulnak. De a perdület megmaradási tétele miatt az egész fémhengernek is el kell fordulnia ahhoz, hogy a rendszer eredő perdülete továbbra is zérus maradjon. Ez az igen kicsiny kis makroszkopikus elfordulás rezonancia módszerrel felerősíthető. Ekkor az áram irányát éppen a mechanikai torziós rendszer rezonancia frekvenciájának az ütemében változtatjuk. A mérés eredménye az, hogy az elektron spinje, pontosabban a spinnek a mágneses tér irányára vett S_z vetülete, csak $\pm \hbar / 2$ értéket vehet fel.

Mint már említettük, az eredeti elképzelés az volt, hogy a ferromágnességért az "atómi áramok", azaz az atómi elektronok pályaalapotában fellépő mágneses momentum a felelős. Ha ez így lenne, akkor a mért perdületre (a pályaalapotoknak megfelelően) a \hbar többszöröse adódott volna. Mivel nem ezt mérték, ezért nevezték az effektust "mágneses anomáliának".

A mérési eredmények szerint tehát az elektron saját mágneses momentumának és a spinjének az aránya kétszer akkora, mint a pályamozgásból adódó ugyanezen mennyiségeké.

Ez a nagyon fontos kísérleti eredmény azt bizonyítja, hogy a spin nem egy klasszikus dinamikai változó, jóllehet a mértékegysége ugyanaz, mint a klasszikus perdületé.

Ezért a spin kvantummechanikai modelljének kidolgozásánál „bajban” leszünk! Mivelhogy nincsen klasszikus definíció, így a 2.axiómában előírt eljárás a "spin-operátor" definiálására nem alkalmazható.

Az eddig használt séma:

"Klasszikus mechanika → Operátorok → Sajátérték egyenlet → Fizikai értelmezés → Mérés."

helyett egy "fordított" utat kell követnünk. Ugyanis most a mért (kvantált) sajátértékek ismeretében kell "kitalálni" a dinamikai változót reprezentáló operátort és így annak kvantummechanikai tulajdonságait.

Az alkalmazandó séma tehát a következő:

"Mérés→Fizikai értelmezés → Sajátérték egyenlet → Operátorok → Kvantummechanikai elmélet."

Hasonló problémával a részecskefizikusok nap mint nap találkoznak. Az elemi részecskéknek ugyanis számos olyan tulajdonsága van, amelyeknek nincsen megfelelője a klasszikus fizikában. Valójában az elemi részecskéket éppen ezen tulajdonságaik alapján osztályozzuk. Ezeknek (hogy „beszélni tudjunk” róluk) valamilyen nevet kellett adni. Ezek csak „fantázia-nevek”, tehát ha esetleg van is eredeti jelentésük, azt nem abban az értelemben használjuk. Az elméleti fizikusok fantáziája itt is meglehetősen játékosnak és élénknek bizonyult. Az izospin, a barionszám, a ritkaság, a leptontöltés, a kvarkok "színe", és "íze" mind-mind olyan tulajdonságokat jelölnek, amelyek a klasszikus fizika szintjén nem "láthatók", így nem is alakult ki bennünk velük kapcsolatos "hétköznapi szemléletes" kép. Itt egyedül csak a matematikára támaszkodhatunk. A részecskefizikában ennek alapján alakítjuk ki azt a sajátos szemléleti rendszert amelyben gondolkozva próbáljuk "megérteni a Természet titkait". Itt a vezérfonal mindig valamilyen „megmaradási tétel” és azokat szűkítő „kiválasztási szabályok” felismerése. Mindezek mélyén a Természet valamilyen „szimmetria tulajdonsága” húzódik meg. Ezen szimmetriák olyan általános szabályszerűségek, absztrakt „mintázatok” amelyek leírására a „matematika”, mint a „mintázatok tudománya” egyedül alkalmas. Ez az a „királyi út” amely a Természet megértéséhez elvezethet. A „Nagy Bumm”-tól az „emberi értelemig”, amely megérti a „Nagy Bumm”-ot a bonyolultság és a szervezethez hihetetlen gazdagságával találkozunk. Hát igen: „Felség ! A Világ Nagyon Bonyolult!”.

A spint, mint az elektronnak egy sajátos tulajdonságát, először S.A.Goudsmit és G.E.Uhlenbeck vezette be a kvantummechanikába 1925-ben. Az általuk kidolgozott spin-fogalom jelentősége messze túlnőtt azon, amit a felfedezők gondoltak.

A spinre jellemző kvantumszám(ok) definiálása legegyszerűbben a pályamozgásból adódó perdület mintájára történhet. Tételezzük fel, hogy az elektron spinje és mágneses momentuma éppen olyan elemi tulajdonsága az elektronnak, mint a tömege vagy a töltése. A pályamozgásból adódó momentumok mintájára be kell vezetni az "s" (ami az "l" mellékkvantum-számmal analóg), és az "m_s" (ami az "m_l" mágneses kvantumszámmal analóg) kvantumszámokat valamint a "g_s" (giromágneses) faktort. Ez utóbbi a perdület és a mágneses momentum arányát mérő pusztán szám.

Az elmélet helyességét az bizonyítja, hogy a saját mágneses momentum mért értékeit (Stern-Gerlach) beírva az elméletbe, az kiadja az elektronspin mért értékeit (Einstein-deHaas). Mivel az "s" csak egyetlen értéket vesz fel (1/2), ezért nem tekinthető igazi kvantumszámmak, hiszen minden elektronállapotban mindig ugyanaz az értéke. Új kvantumszám az "m_s = ±1/2", amelyet találóan "spin kvantumszámmak" hívunk. Ezzel tulajdonképpen a Bohr-Sommerfeld féle (továbbfejlesztett) atommodell elektronjainál alkalmazott Pauli elv negyedik kvantumszámát „fedezték fel”.

A spin vektormodellje a pályamomentum mintájára készíthető el.

Ha az elektron spinjéről beszélünk, akkor mindig a spin "z" irányú vetületére az S_z-re gondolunk. Tehát, ha azt mondjuk például, hogy az elektron spinje: „felfelé áll”, vagy „pozitív”, vagy „+1/2”, vagy „+ħ/2”, stb..., akkor ez mind azt jelenti, hogy az S_z = + ħ/2.

1.4.3. A spin-pálya kölcsönhatás

Láttuk azt, hogy nincsen olyan klasszikus mechanikai fogalom, amelyik az elektronspinnek felel meg. Ezért a spin-operátor definiálására a 2. axiómában előírt módszer nem alkalmazható. Mint említettük, most egy inverz eljárást kell követnünk. Azaz a sajátértékek ismeretében kell megkonstruálni a spin "z" irányú komponenséhez rendelhető \hat{S}_z operátort és a sajátfüggvényeket. A klasszikus fogalom hiánya miatt csak a heurisztikus utat követhetjük. (Heuristica=görög szó, jelentése: feltalálás, valamire való rájövés.) Legyen a $\chi(\xi)$ spin állapotfüggvény valamilyen ξ változó függvénye, amit "spin változónak" hívunk. A $+\hbar/2$ sajátértékhez tartozzon az $\alpha(\xi)$ sajátfüggvény, a $-\hbar/2$ sajátértékhez tartozzon a $\beta(\xi)$ sajátfüggvény. A továbbiakban mindig így fogunk ezekre hivatkozni.

Nem szükséges, hogy valamiféle konkrét klasszikus kép kapcsolódjon ezekhez, hiszen a dolgok lényegénél fogva ez amúgy is lehetetlen volna. Valamiféle támpontot nyújthat az, ha a spint egy adott nagyságú, klasszikus vektorként képzeljük el, de azzal a megszorítással, hogy a skalár komponensei eleget tesznek a kvantummechanikai törvényeknek. Jelen esetben a "z" irányú komponens csak kétféle ("fel" vagy "le") lehet, valamint az "x" és az "y" vetület teljesen határozatlan. A ξ változó, némi fantáziával, a vektor \mathcal{G} polárszögéből absztrahálható.

Egy elektron fizikai viselkedését az atomban nem csak az őt reprezentáló elektronfelhő szabja meg, hanem az elektron spinje is. Mindezen tulajdonságokat együttesen megadó állapotfüggvényt "spin-pályának" nevezzük. A spin-pálya állapotot az atomban négy kvantumszám fogja megadni (n, l, m_l, m_s) és az állapotfüggvény négy változónak $\{x, y, z, \xi\}$ a függvénye. Az elmondottak miatt az elektron állapot jelölésére a $\Phi_{n,l,m_l,m_s}(\vec{r}, \xi)$ szimbólumot fogjuk használni. Ez a jelölés azt is kifejezi, hogy az elektronfelhő eloszlása

(azaz a megtalálási valószínűség!) függ az elektron spinjétől is. Ennek oka az úgynevezett "spin-pálya" kölcsönhatás. Ennek szemléletes fizikai tartalma az, hogy az elektronnak a pályamozgásból származó \vec{M}_L és a saját \vec{M}_S mágneses momentuma (hasonlóan, mint két mágneses dipólus) kölcsönhatásba lép egymással. Az ebből adódó $V_{SL} = -a \cdot \vec{L} \cdot \vec{S}$ potenciális energia jellemzi a spin-pálya kölcsönhatást. Ha ezt elhanyagoljuk, azaz ha ez a (kölcsönhatásra jellemző) operátor nem szerepel a Hamilton operátorban, akkor a teljes $\Phi_{n,l,m_l,m_s}(\vec{r}, \xi)$ állapotfüggvény szeparálható lesz és előállítható egy $\Psi_{n,l,m_l}(\vec{r})$ pálya állapotfüggvény és egy $\chi_{m_s}(\xi)$ spinfüggvény szorzataként. A pályaállapotokat most már csak "külső" tényezők határozzák meg, az elektron spinjétől független lesz.

Ezek után pontosíthatjuk a már ismertetett Pauli elvet. Eszerint egy elektronrendszerben (pl: egy atomban) nem lehet két elektron ugyanabban a spin-pálya állapotban. Illetve (ha a spin-pálya kölcsönhatást elhanyagoljuk, akkor) egy pályaállapotban maximum két ellentétes spinű elektron lehet [$\uparrow\downarrow$]. Az atomok elektronszerkezetét szemléltető blokk diagramban egy \square blokk egy pályaállapotot reprezentál. A Hund szabály szerint az alhéjak betöltése úgy történik, hogy a pályaállapotokban egyedül lévő elektronok (ún. "nem kompenzált spinek") száma mindig a lehető legnagyobb legyen.

OROSZ L. Kvantummechanika 72.oldal

1.5. Sok (azonos) részecskéből álló rendszer vizsgálata

1.5.1. Az energia operátora és az állapotfüggvény

Eddig csak egyetlen részecske kvantummechanikai tulajdonságait vizsgáltuk. A valóságban azonban szinte mindig több azonos részecskéből álló rendszerrel van dolgunk (pl: atomok elektronszerkezete) Szükség van tehát a kvantummechanika sokrészecskés kiterjesztésére. Mindezt az atomokon, mint egy konkrét reális példán, fogjuk bemutatni. Természetesen a kapott általános törvények más, sok azonos részecskéből álló rendszerre is érvényesek. A szokásos sémát alkalmazzuk: "Klasszikus mechanika \rightarrow Operátorok \rightarrow Sajátérték egyenlet \rightarrow Fizikai értelmezés \rightarrow Mérés."

Tekintsünk N darab pontszerű elektronból álló klasszikus fizikai rendszert. A rendszer teljes dinamikai leírásához ismerni kell minden elektron helyét és impulzusát. Ezek lesznek tehát a dinamikai alpmennyiségek: $\{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_3, \dots, \vec{p}_N\}$. A rendszer Hamilton függvénye (azaz az összenergiát megadó függvény) tartalmazza a részecskék közötti kölcsönhatást megadó $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)$ potenciális energia kifejezését is.

A kvantummechanikára a 2.axióma szerint kell áttérni. Az alpmennyiségekhez rendelt operátorok definiálása az egyetlen részecske esetén megtanultak mintájára történik. Azaz minden egyes elektron hely- és impulzuskordinátájához a szokásos módon rendelünk operátorokat.

Hanyagoljuk el a spin-pálya kölcsönhatást! A Hamilton operátor most $3N$ független változót tartalmaz, így a (pálya)állapotfüggvény is egy $3N$ változós függvény lesz: $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)$. A részecskék (elektronok) közötti (Coulomb) kölcsönhatást megadó potenciális energia olyan, hogy a rendszer hullámfüggvénye nem szeparálható, azaz nem fejezhető ki egyrészecske hullámfüggvények szorzataként:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N) \neq \psi_1(\vec{r}_1) \cdot \psi_2(\vec{r}_2) \cdot \psi_3(\vec{r}_3) \cdot \dots \cdot \psi_N(\vec{r}_N).$$

Egyszerű számolással meggyőződhetünk arról, hogy egy $3N$ változós függvény kiszámítása gyakorlatilag megoldhatatlan feladatot jelent. Tekintsük például a nátrium atomot! Ennek 11db elektronja van. Így a állapotfüggvény 33 db változót tartalmaz. Ha minden változó csak 10 értéket vesz fel (ami eléggé pontatlan számolást jelentene), akkor 10^{33} adatot kell kiszámítani. Tegyük fel, hogy egyetlen adatot 1 nanosecundum

(10^{-9} secundum) alatt lehet meghatározni. Akkor ehhez 10^{24} sec idő szükséges. Tájékoztatóul az Univerzum kora 15 milliárd év, azaz kb. $5 \cdot 10^{17}$ secundum. Látható, hogy sokváltozós állapotfüggvény egzakt kiszámítása lehetetlen. Számolni csak szeparált alakban megadott állapotfüggvénnyel lehet. Ezért **közelítéseket fogunk alkalmazni.**

A részecske rendszer pálya állapot függvényének a fizikai tartalma (az egyrészecske állapotfüggvényhez hasonlóan) a részecskék megtalálási valószínűségével van kapcsolatban. Pontosabban a $|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)|^2 dV_1 dV_2 dV_3 \dots dV_N$ kifejezés annak a valószínűségét jelenti, hogy az az első részecskét az \mathbf{r}_1 pont dV_1 környezetében, ugyanakkor második részecskét az \mathbf{r}_2 pont dV_2 környezetében, stb... az N-ik részecskét az \mathbf{r}_N pont dV_N környezetében találjuk.

OROSZ L. Kvantummechanika 73. oldal

1.5.2. A Hartree közelítés és az SCF módszer

A lehető legegyszerűbb, a valóságban is önállóan létező "sok elektronos" rendszer a Hélium atom. Csak két elektronnal rendelkezik ugyan, de ez már elegendő ahhoz, hogy a kvantummechanikai több részecske probléma közelítő módszereit bemutassuk rajta.

A továbbiakban a spin-pálya kölcsönhatást elhanyagoljuk, így csak a pályaalapot-függvényt kell meghatározni. A spin csak az állapotok betöltésekor alkalmazandó Pauli elvénél vesszük figyelembe. Mint arra már a bevezetőben utaltunk, az elektronok közötti kölcsönhatás miatt a pályaalapot-függvény nem szeparálható, azaz az egzakt megoldás nem írható fel két egyrészecske állapotfüggvény szorzataként.

Kiindulásul próbálkozhatunk a legdurvább közelítéssel, amikor is az elektronok közötti kölcsönhatást elhagyjuk. Ekkor mindkét elektron csak az atommag elektromos terét érzékeli ugyanúgy, mint a hidrogénszerű ion esetén. A rendszer hullámfüggvénye most már szeparálható. A két hullámfüggvény mindegyikére ugyanazt a (hidrogénszerű ionnál már részletesen megoldott) Schrödinger egyenletet kapjuk, csak az egyikben az \mathbf{r}_1 a másikban az \mathbf{r}_2 változó szerepel. Matematikailag tehát csak egyetlen egyenletet kell megoldani. Ennek az Schrödinger egyenletnek a megoldásait már ismerjük. Ezek szolgáltatják azokat a lehetséges állapotokat, amelyeket a két elektron a Pauli-elv szerint majd betölt Tulajdonképpen a már megismert szemléletes „blokkdiagram” módszerhez jutottunk.

OROSZ L. Kvantummechanika 74. oldal

A kísérleti eredmények azt mutatják, hogy a kölcsönhatás mentes elektron modell meglehetősen pontatlan. Szükség van az elektronok közötti kölcsönhatás valamilyen módon történő figyelembe vételére is! Két, egymásnak élesen ellentmondó dolgot kell összeegyeztetnünk. Egyrészt számolnunk kell a kölcsönhatással, de ugyanakkor a szeparálhatóságot is valahogyan biztosítanunk kell. Ezt a feladatot az ún. Hartree közelítéssel sikerült megoldani.

Az egyszerűség végett maradjunk továbbra is a Hélium atomnál! Mint már említettük, ezen a két elektronnal álló rendszeren az eljárás lényege már bemutatható és az eredmények majd igen szemléletesen általánosíthatók sok elektronnal (sok azonos részecskéből) álló rendszerre is.

A 3. és a 4. axiómából látható, hogy ha az elektronrendszer átlagenergiáját éppen valamelyik $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ "energia sajátállapotban"(!) számoljuk ki, akkor pontosan az ehhez az állapothoz tartozó E energiaszintet kapjuk meg. Ha a Ψ egzakt állapotfüggvény helyett valamilyen $\tilde{\Psi}$ közelítő függvényt használunk, akkor az így adódó kvantummechanikai átlag csak közelítőleg adja meg a valódi (mérhető) energia értékét:

$$\tilde{E} = \langle \tilde{\Psi} | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle \approx E$$
 Az eddigiekből kiderült, hogy sokelektronos rendszerek esetén az egzakt (és ezért nem szeparálható!) állapotfüggvényeket nem ismerjük és pontos meghatározásukra még csak reményünk sincsen. Ezért csak közelítő megoldásokra szorítkozhatunk! A közelítés "jósága" attól függ, hogy a fentebb említett átlagérték mennyire közelíti meg a kísérletekben mérhető energia (saját)értéket. Ez támpontot ad egy közelítő eljárás kidolgozására.

Keressük ugyanis azt a lehető legjobb közelítést, amely $\tilde{\Psi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \equiv \varphi_i(\vec{r}_1)\varphi_j(\vec{r}_2)$ szeparált alakba írható. Ezt nevezzük "egyrészecske, vagy egyelektron" közelítésnek. A teljes rendszer, szorzat formájában felírt állapotfüggvényében szereplő $\varphi_i(\vec{r}_1)$ és $\varphi_j(\vec{r}_2)$ tényezőket pedig "egyrészecske (vagy egyelektron) állapotfüggvényeknek" hívjuk. Ezzel tulajdonképpen azt tételeztük fel, hogy fizikailag is van értelme egy

elektron állapotáról beszélni egy elektronrendszeren belül! Ekkor ezeket a φ_i, φ_j egyelektron állapotokat olyan Schrödinger egyenletekből határozhatjuk meg, amelyekben az elektronok közötti kölcsönhatást is figyelembe vesszük. Ez formálisan úgy történik, hogy az egyelektron Schrödinger egyenletekbe egy-egy új potenciális energia tagot $\{U_1(\vec{r}_2), U_2(\vec{r}_1)\}$ írunk be, amelyek a másik elektron hatását modellezi. Ennek a potenciálnak a megadásán múlik a közelítő módszer eredményessége. Létezik olyan szisztematikus (görög szó, szigorúan következetes jelent) eljárás, amellyel ez a potenciál egyre nagyobb pontossággal meghatározható. Mi, ehelyett első közelítésként, egy igen szemléletes módon megkonstruálható potenciált fogunk használni. Ezt nevezzük Hertree-közelítésnek. A keresett potenciálhoz heurisztikus úton juthatunk el.

Vegyük, tehát a Hélium atomot és határozzuk meg a második elektron hatását az elsőre! Tekintsük a második elektront egy olyan $\rho_j(\vec{r}_2)$ töltésfelhőnek, amelyet az ő $\varphi_j(\vec{r}_2)$ egyrészesce állapotfüggvénye határoz meg a következő (triviális) módon $\rho_j(\vec{r}_2) \equiv -e \cdot |\varphi_j(\vec{r}_2)|^2$. Azaz az elektron töltését a megtalálási valószínűségnek megfelelően fogjuk "elkenni" a térben. Ennek a töltésfelhőnek az elektromos terét fogja érzékelni az első elektron. Így a pozitív töltésű atommag Coulomb kölcsönhatását megadó $V_c(\vec{r}_1)$ potenciális energia mellett fellép a második elektron ugyancsak Coulomb hatása által létrehozott

$$U_2(\vec{r}_1) = \int_{\infty} \frac{e^2 |\varphi_j(\vec{r}_2)|^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} dV_2 \text{ ún. Hartree potenciális energia tag is. Ezt a két potenciálfüggvényt kell tehát}$$

beírunk az első elektron Schrödinger egyenletébe:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 + V_c(\vec{r}_1) + U_2(\vec{r}_1) \right] \varphi_i(\vec{r}_1) = \tilde{\epsilon}_i \cdot \varphi_i(\vec{r}_1).$$

Ugyanígy járunk el a másik elektron esetében is.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 + V_c(\vec{r}_2) + U_1(\vec{r}_2) \right] \varphi_j(\vec{r}_2) = \tilde{\epsilon}_j \cdot \varphi_j(\vec{r}_2).$$

Az így kapott ún. "csatolt integro-differenciálegyenlet rendszer" megoldása sem egyszerű, de legalább egy elvileg kezelhető modellhez jutottunk. Ezt a közelítést „SCF módszernek” hívjuk és mindig így fogunk rá hivatkozni. Az „SCF” egy betűszó, a Self Consistent Field angol kifejezésből származik. Ennek jelentése kb. „önmagával összhangban lévő mező”. Az elnevezés valóban találó, hiszen a φ egyelektron állapotfüggvények éppen ezen φ -k által definiált U Hartree potenciálok segítségével határozhatók meg.

Az egyenleteket iterációs módon (fokozatos megközelítéssel) old(hat)juk meg. Azaz kiindulásul feltételezünk egy $\varphi^{(0)}$ megoldást. Ezekkel kiszámítjuk a $U^{(0)}$ Hartree potenciálokat, és az így adódó Schrödinger egyenleteket megoldjuk. A kapott $\varphi^{(1)}$ megoldásfüggvények által meghatározott új $U^{(1)}$ Hartree potenciálok újabb $\varphi^{(2)}$ megoldásfüggvényeket szolgáltatnak stb.... Az eljárást addig kell folytatnunk, ameddig a két egymást követő lépésben kapott állapotfüggvények már csak kevésbé térnek el egymástól, azaz $\varphi^{(n)} \approx \varphi^{(n+1)}$. Sajnos ez az eljárás nem mindig konvergál! Ekkor újabb "trükköket" kell kitalálni. De ez már nem fizikai hanem inkább numerikus számítási probléma.

A Hartree módszert kételektronos rendszerre mutattuk be, de természetesen tetszőleges N számú elektront tartalmazó rendszerre is alkalmazható. Ekkor N db csatolt egyelektron Schrödinger egyenletünk lesz. Mindegyik egyenletben a Hartree potenciál a többi (N-1 db.) elektron hatását foglalja magába. Már kis N-ek esetén is a számolási nehézségek igen nagyok. Ezen egy újabb közelítéssel segíthetünk.

Ennek alap gondolata az, hogy minden elektron teljesen egyforma. Ezért feltételezhetjük, hogy az adott rendszer valamelyik elektronjának a Hartree-potenciálja egy "bizonyos mértékig ugyanolyan (?)” lesz mint a

rendszer bármely más elektronjáié. Azaz a rendszeren belül minden egyelektron Schrödinger egyenlet gyakorlatilag ugyanolyan. (Éreznünk kell, hogy az óvatos fogalmazás nem véletlen!) Így tehát matematikai értelemben ismét csak egyetlen Schrödinger egyenletünk lesz, amelyben a Hartree potenciált egy valamilyen közelítő, kiátlagolt potenciálfüggvény alakjában adjuk meg. Ezt gyakran egybeolvasztjuk a külső testek által produkált potenciálokkal (pl.: az atommagok vagy iontörzsek hatásával) és ezt így együtt valamilyen ún. "modellpotenciállal" közelítjük. Ezek a modellpotenciálok bonyolult rendszerek esetén nagy intuíciót követelő elméleti megfontolások alapján adhatók meg. De ez már az ezen a területen tevékenykedő fizikusok feladata.

Az így kapott egyelektron Schrödinger egyenlet $\{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots, \varphi_n, \dots\}$ sajátfüggvény rendszere fogja szolgáltatni a rendszer elektronjainak a lehetséges állapotait. Ezen állapotok betöltése a Pauli-elv figyelembevételével történik. Itt ismét a már tanult „blokk diagramra” kell utalnunk.

Egy ilyen intuitív modellpotenciállal mi is találkozunk majd a fémek szabadelektron elméletének a tárgyalása során. Ennek a lényege az, hogy a fémekben lévő bármelyik vezetési elektronra a kristályt alkotó pozitív iontörzsek és a nagyszámú többi elektron egyszerre hat. Ezek első közelítésben semlegesítik egymást és így az elektron a fém belsejében "nem érzeli" eredő töltéseket, ezért "szabadon" (?) tud mozogni. A felület közvetlen közelében a fizikai viszonyok azonban megváltoznak. Ezt mutatja az a tény, hogy az elektronok maguktól nem hagyják el a fémeket, mert az iontörzs- és elektron-háttér ezt valamilyen módon megakadályozza. Ez az amúgy igencsak bonyolult hatás egy potenciáldobozzal helyettesíthető. Ez lesz most a modellpotenciálunk. A térbeli potenciáldoboz esetén kapott állapotfüggvények adják a fémelektronok lehetséges állapotait. A további részletekre és a belőlük levonható fizikai következtetésekre még a későbbiekben visszatérünk majd.

OROSZ L. Kvantummechanika 76. oldal

1.5.3. A Pauli elv

Tekintsünk egy N db azonos részecskéből álló rendszert! Minden egyes részecskét most az \vec{r}_i helykoordinátájával és a ξ_i spinváltozójával jellemezünk. Ezt az (\vec{r}_i, ξ_i) koordináta négyest egy \bar{x}_i szimbólumba foglaljuk össze. A rendszer teljes spinpálya állapotfüggvénye tehát most így írható fel: $\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3, \dots, \bar{x}_N)$. A részecskék legyenek egymástól megkülönböztethetetlenek. Ekkor, ha két részecskét megcserélünk akkor a rendszerben semmiféle fizikai változást észlelni nem lehet. Ez azt is jelenti, hogy az állapotfüggvény fizikai tartalmának sem szabad megváltoznia. Azaz a $|\Phi|^2$ invariáns (változatlan) két részecske megcserélésével szemben. Ez magára a Φ állapotfüggvényre nézve azt jelenti, hogyha a rendszerben két részecskét megcserélünk, akkor a Φ egy egységnyi abszolút értékű komplex számmal fog szorozódni. Ugyanazon két részecske kétszeres cseréje az eredeti sorrendet adja vissza. Ezért végül is az adódik, hogy ha a rendszer bármely két azonos részecskéjét megcseréljük, akkor a Φ állapotfüggvény (+1)-el vagy (-1)-el szorozódik, azaz vagy előjelet vált vagy nem. Ekkor azt mondjuk, hogy a rendszer állapotfüggvénye szimmetrikus (+) illetve antiszimmetrikus (-).

A kérdés mármint az, hogy a természetben vajon melyik eset valósul meg?

A tapasztalat azt mutatja, hogy mindkettő! Ezt a megfigyelésünket az ún. „**általános Pauli**” elvben fogalmazzuk meg. Eszerint:

„Fermionokból” álló rendszer állapotfüggvénye antiszimmetrikus míg a „bozonokból” álló szimmetrikus.

A fermionok a feles spinű részecskék gyűjtő neve. Azok a részecskék tartoznak ide, amelyeknek a S_z spinje

$$\left\{ \pm \frac{1}{2} \hbar, \pm \frac{3}{2} \hbar, \pm \frac{5}{2} \hbar, \pm \dots \right\}. \text{ A fermionok E. Fermi és P.A.M- Dirac által kidolgozott kvantum-statisztikai}$$

törvényeket követik. Innen van az elnevezésük is. A bozonok az egész spinű részecskék gyűjtő neve. Azok a részecskék tartoznak ide, amelyeknek az S_z spinje: $\{0, \pm \hbar, \pm 2\hbar, \pm 3\hbar, \pm \dots\}$. A bozonok kvantumstatisztikáját Bose és A. Einstein dolgozta ki. Az elnevezés az ő munkásságukra utal. Az általánosított Pauli elv tehát egy alapvető szimmetria következtében fellépő, igen általános és ezért nagyon fontos törvényt fogalmaz meg, amely

a vizsgált rendszert alkotó azonos mikrorészecskék megkülönböztethetlenségéből fakad. Ezáltal a kvantummechanika axiómarendszerét sokrészecskéből álló rendszerekre is kiterjeszti.

A rendszer állapotfüggvényének a szimmetriájában jelentkező látszólag „kis” (előjel) különbségnek messzemenő következményei vannak, ami miatt a kétféle rendszer makroszkopikus viselkedése lényegesen eltér majd egymástól. Ennek oka viszonylag egyszerűen belátható.

Tekintsünk egy, két fermionból álló rendszert. Ha a rendszer $\Phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ állapotfüggvényét közelítőleg a tanult módon $\tilde{\Phi}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \phi_1(\vec{x}_1)\phi_2(\vec{x}_2)$ szeparált alakba írjuk, akkor az nem teljesíti az általános Pauli elvet. Azaz nem vált előjelet, ha a két fermiont megcseréljük. Mivel két fermion teljesen egyforma, így bármelyik lehet akármelyik (ϕ_1 -el vagy ϕ_2 -vel jelölt) egyrészecske spinpálya állapotban. Ezért ezt is figyelembe kell venni, amikor az egyes fermionokkal betöltjük az egyrészecske állapotokat. A mi esetünkben ez a következő lesz:

$$\tilde{\Phi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) - \phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1)].$$

Az $1/\sqrt{2}$ együttható azt fejezi ki, hogy mind a kétféle részecske kiosztásnak egyformán $1/2$ a valószínűsége. A fenti kifejezés matematikailag tömörebben egy determináns formájába is írható:

$$\tilde{\Phi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_1(\vec{r}_1) & \phi_1(\vec{r}_2) \\ \phi_2(\vec{r}_1) & \phi_2(\vec{r}_2) \end{vmatrix}.$$

Ezért az ily módon megkonstruált állapotfüggvényt, utalva annak matematikai alakjára, „determináns hullámfüggvénynek” szoktuk nevezni. Hangsúlyoznunk kell a következőt. Annak ellenére, hogy ez a „determinánsos” felírás pusztán csak a tömörítés célját szolgálja, mégis (mint az mindjárt kiderül) az általánosítás során igen nagy könnyebbséget jelent majd.

Ha nem csak kettő, hanem pl. „N” db. (azonos) fermionból áll a rendszer, akkor is hasonló módon járunk el közelítő $\tilde{\Phi}$ állapotfüggvény előállításakor. Veszünk N db egyrészecske spinpálya állapotot, és ebbe elhelyezzük az N db. fermiont. Csak akkor kapunk antiszimmetrikus $\tilde{\Phi}$ állapotfüggvényt, ha egy spinpálya állapotba maximum egy fermiont teszünk, és a rendszer állapotfüggvényét az összes lehetséges kiosztás (permutáció) megfelelő szuperpozíciójaként állítjuk elő (1. axióma). Az egyes permutációknak megfelelő állapotfüggvényeket úgy kell szuperponálni, hogy az így kapott eredő állapotfüggvény antiszimmetrikus legyen. Az kétrészecskés esetből látható, hogy a közelítő állapotfüggvényt egy egyrészecske állapotokból felépített determináns alakjában célszerű felírunk. Ugyanis a "determináns hullámfüggvény" kifejtési definíciója éppen úgy váltogatja az egyes tagok előjelét, hogy az antiszimmetrikussá teszi magát az állapotfüggvényt. Egyszerűen belátható az is, hogy a determináns hullámfüggvény eleget tesz az eredeti Pauli-elvnek, amely szerint nem lehet két fermion (pl. elektron) ugyanabban a spin-pálya állapotban.

OROSZ L. Kvantummechanika 77. oldal

Vizsgáljunk most meg egy két bozonból álló rendszert. Ha megint az egyszerű szorzat alakban felírt $\tilde{\Phi}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \phi_1(\vec{x}_1)\phi_2(\vec{x}_2)$ szeparált állapotfüggvényt tekintjük, akkor ez nem teljesíti ebben az esetben sem az általános Pauli elvet. Azaz, ha a két bozont megcseréljük, akkor nem kapjuk vissza magát a változatlan $\tilde{\Phi}$ állapotfüggvényt. A megoldás menete most is az, mint a fermionok esetén volt. Mivel a két bozon teljesen egyforma, így akármelyik kerülhet bármelyik állapotba. Tehát a teljes rendszer hullámfüggvényében az összes olyan lehetséges elrendezést figyelembe kell venni, amelynek a összenergiája megegyezik. A szimmetria most akkor is teljesül, ha mind a két fermion ugyanabban a pályaállapotban van. Ez egy lényeges különbség a fermion és a bozon rendszer között. Ez akkor válik még jobban szembeütővé, ha viszonylag nagyszámú részecskéből álló rendszerek alapállapotát hasonlítjuk össze. Látható, hogy fermionrendszer esetén az állapotok egy magas energiaszintig be vannak töltve, ugyanakkor minden bozon a legkisebb energiájú állapotban van. Ez pedig lényeges különbségre vezet a két rendszer makroszkopikus viselkedésében. A későbbiekben majd látunk erre példákat is.

Nagyon nagyszámú részecskéből álló rendszerek makroszkopikus viselkedésének a leírásával a termodinamika foglalkozik. A rendszer állapotának a jellemzésére (termodinamikai) állapotjelzőket használunk (pl.: nyomás, térfogat, hőmérséklet, entrópia, részecskeszám = össztömeg, kémiai potenciál, stb...). Ezekről az eddigi fizika tárgyakban (FizikaC1 és C2) már részletesen tanultunk.

Az igen részletes, minden egyes részecskét nyomon követő (és emiatt gyakorlatilag megvalósíthatatlan!) mikroszkópikus tárgyalás és a mikrofizikai háttérrel teljesen elfeledkező termodinamikai leírás között a "statisztikus fizikai" modell jelent egy közbülső, áthidaló megoldást. A továbbiakban ezzel a módszerrel fogunk nagy vonalakban megismerkedni.

OROSZ L. Kvantummechanika 78.oldal

1.5.4. Kvantumstatisztikák

Az előzőekben már megbeszéltük, hogy nagyszámú azonos részecskéből álló rendszerek kvantummechanikai tárgyalásakor mindig az egyrészecske közelítésben dolgozunk. Feltesszük, hogy a rendszerben definiálhatók egyrészecske állapotok. Tételezzük fel, hogy ezeket valamilyen módon a lehető legpontosabban sikerült már meghatározni. A statisztikus fizika azt vizsgálja, hogy ezek az egyrészecske állapotok hogyan vannak betöltve a rendszer egy, makroszkópikus állapotjelzőkkel jól definiált, termodinamikai (makro) állapotában. Mint azt láttuk, a "betöltési szabály" más a fermionokra (egy spinpálya állapotban legfeljebb egy fermion lehet) és megint más a bozonokra (itt egy spinpálya állapotban akárannyi bozon lehet) nézve. A két fajta rendszert egyszerre fogjuk tárgyalni. Az általános módszer ugyanis mindkét esetben ugyanaz. Így jól láthatóak majd a különbségek is.

A rendszer egy gerjesztett (nem a legalacsonyabb energiájú) állapotát fogjuk vizsgálni. Ez a makroszkópikus skálán (termodinamika) azt jelenti, hogy a rendszer hőmérséklete az abszolút nulla fölött van. Az egyrészecske állapotok általában degeneráltak, azaz több állapot is van, amelynek az energiája ugyanakkora. Legyen d_i azon egyrészecske állapotok száma, amelyek ugyanahhoz az ε_i energiaszinthez tartoznak. Legyen az ε_i energiájú részecskék száma a rendszerben n_i . Azaz a d_i lehetséges állapotban összesen n_i számú részecske van. A feladat az, hogy kiszámítsuk az n_i ($i=1,2,3,\dots$) számokat a T hőmérséklet függvényeként. Magyarul az, hogy meghatározzuk, hogyan töltődnek be az egyrészecske állapotok a T hőmérsékleten.

A megoldás elvi módszerével már a klasszikus kinetikus gázelmélet kapcsán megismerkedtünk. Ismételjük át az ott bevezetett fogalmakat! Ezek: a makroállapot, a mikroállapot és a termodinamikai valószínűség. A makroállapot tulajdonképpen egy termodinamikai állapot, azaz a rendszernek egy, a mérhető makroszkópikus állapotjelzőkkel meghatározott, állapotát jelenti. A mikroállapot a részecskék szintjén jelenti a rendszer egy állapotát, tehát ekkor minden egyes részecske állapotát ismernünk kell. Nyilvánvaló, hogy a rendszer egy makroállapotához nagyon-nagyon sok mikroállapot tartozik. Gondoljunk csak a kinetikus gázelméletre mint analógiára! A termodinamikai valószínűség éppen az a W szám, amely megadja, hogy egy adott makroállapotot hány mikroállapot valósít meg. Mármost a **statisztikus fizika alapfeltevése** (amit az általa kapott helyes eredmények sokasága bizonyít) az, hogy a rendszer minden mikroállapota egyforma valószínűséggel valósul meg. Azaz a Természet nem részesít előnyben egyetlen egy mikroállapotot sem a többihez képest. Ezek után már nyilvánvaló, hogy a valóságban az a makroállapot fog megvalósulni, amelyet a legtöbb mikroállapot valósít meg. Azaz amelynek a termodinamikai valószínűsége a legnagyobb. (Innen adódik az elnevezés is.)

A most vizsgálandó modellünkben egy makroállapotot az $\{n_1, n_2, n_3, \dots, n_i, \dots\}$ adatsor határoz meg. Egy mikroállapot pedig egy lehetséges részecske-betöltést jelent. A feladat tehát azon n_i ($i=1,2,3,\dots$) betöltési számok meghatározása, amelyeknél a $W(n_1, n_2, n_3, \dots, n_i, \dots)$ termodinamikai valószínűség maximális értékét vesz fel.

A rendszer termodinamikai valószínűsége az egyes energiaszinteken számítható lehetséges betöltések szorzata lesz. Hiszen bármelyik energiaszinten egy megadott konkrét betöltési elrendezéshez a többi energiaszinten lehetséges összes elrendezés hozzárendelhető. A feladat tehát arra korlátozódik, hogy meghatározzuk azt, hogy d_i állapotot hányféleképpen lehet n_i fermionnal illetve bozonnal betölteni. Ismerve a fermionokra és a bozonokra érvényes betöltési szabályokat, az alábbi modellekhez juthatunk.

A W termodinamikai valószínűség matematikai képlete mind a fermion, mind pedig a bozon rendszer esetén egyszerű kombinatorikai modell segítségével megadható.

Fermionok esetén az ekvivalens kombinatorikai feladat a következő „Hányféleképpen lehet d_i darab dobozba n_i darab egyforma golyót elhelyezni úgy, hogy egy dobozba maximum egy golyó kerüljön?”.

Bozonok esetén az ekvivalens kombinatorikai feladat pedig a következő: „Hányféleképpen lehet $(d_i - 1)$ darab egyforma falat és n_i darab egyforma golyót egy sorban elhelyezni?”

OROSZ L. Kvantummechanika 79. oldal

A feladat ezek után az, hogy mindkét rendszer esetén a $W(n_1, n_2, n_3, \dots, n_i, \dots)$ többváltozós függvény maximumát megkeressük. Azonban a folytonos (!) változóknak tekintett n_i ($i = 1, 2, 3, \dots$) betöltési számok most nem függetlenek egymástól. Két "mellékfeltételt" kell kielégíteniük. Ugyanis a rendszerben a részecskék N száma adott és a rendszer összenergiája a vizsgált termodinamikai állapotban szintén egy meghatározott E érték. Tehát egy ún. "feltételes szélsőérték" feladattal állunk szemben. Az ilyen típusú feladatokat a Lagrange [kiejtése "lagranzs"] által kidolgozott módszerrel oldjuk meg. Ennek az alap gondolata az, hogy a vizsgálandó függvényhez úgy "adunk hozzá zérust", hogy valójában az a mellékfeltételeket tartalmazza. Az így kiegészített függvénynek már a közönséges (feltétel nélküli) maximumát kell megtalálni. A megjelenő két új paraméter (α és β) fizikai jelentését is tisztáznunk kell majd. A számolás során érthetővé váló matematikai okok miatt nem a W -nek, hanem az $\ln W$ -nek fogjuk a maximumát megkeresni. Mivel nekünk igazából a maximum helye, azaz az n_i ($i = 1, 2, 3, \dots$) betöltési számok, kellenek így ez megtehető. Ugyanis az „ln” egy monoton függvény!

A faktoriálisok logaritmusai az ún. Stirling [kiejtése: "sztörling"] formulával egyszerű, jól viselkedő folytonos függvényre alakítható, amelynek a deriváltja könnyen számítható.

OROSZ L. Kvantummechanika 80. oldal

A maximum létezésének a szükséges feltétele az, hogy az elsőrendű derivált zérus legyen. Mivel most többváltozós függvényről van szó, ezért ugyanez igaz a parciális deriváltakra is. A számolás eredményeként megkaptuk azt, hogy az egyes (ϵ_i) energiaszinteken hány darab részecskének kell lenni ahhoz, hogy az a maximális termodinamikai valószínűségre vezessen. Ami azt jelenti, hogy egy tetszőleges termodinamikai állapotban meg tudjuk határozni a részecskék energia szerinti eloszlását. A n_i betöltési számok és a d_i lehetséges állapotszámok (degeneráció) közötti kapcsolatot az $f(\epsilon_i, \alpha, \beta)$ ún. "eloszlásfüggvény" teremti meg. Ez azt mondja meg, hogy az adott ϵ_i energiaszinten lévő n_i részecskék száma hányad része illetve hányszorosa a lehetséges d_i állapotoknak. Valójában ez volt a kitűzött statisztikus fizikai feladatunk. Hátra van még a két szabad paraméterünk, az α és a β fizikai jelentésének a tisztázása. Ezeket a két makroszkopikus állapotjelző (N és E) által definiált mellékfeltételeken keresztül vezettük be. Ezért tehát az α -t és a β -t a rendszer termodinamikai állapota egyértelműen meg kell, hogy határozza.

Mivel a rendszerünk nagyon nagyszámú részecskét tartalmaz, így a viszonylag magas (ϵ_i) energiaszintek is be lesznek töltve és az n_i ($i = 1, 2, 3, \dots$) betöltési számok (az esetek majd mindegyikében) szintén nagyon nagyok lesznek. Ez azt jelenti, hogy a relatív kvantálás elhanyagolható lesz (lásd a potenciáldoboz példáját a 18. oldalon), azaz kvázi-folytonos energiaskálán dolgozhatunk. Ekkor a d_i degeneráció helyett be lehet vezetni a $g(\epsilon)$ ún. spinpálya állapot-sűrűséget. Gyakran, ha ez nem okoz félreértést, egyszerűen csak állapotsűrűséget mondunk. Ez azt jelenti, hogy a $g(\epsilon)d\epsilon$ kifejezés megadja az $(\epsilon, \epsilon + d\epsilon)$ tartományba tartozó spinpálya-állapotok számát. A $g(\epsilon)$ spinpálya állapotok száma a d_s spinállapotok és az $N(\epsilon)$ pályáállapotok számának a szorzataként írható fel.

Ugyanígy a $n(\varepsilon)d\varepsilon$ kifejezés megadja azon részecskék számát, amelyeknek az energiája az $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$ energiatartományba esik. Az eloszlásfüggvény felhasználásával ez az $n(\varepsilon) = g(\varepsilon) \cdot f(\varepsilon, \alpha, \beta)$ módon számítható ki.

A β paraméter meghatározása az E összenergiára vonatkozó mellékfeltételből történik. Mivel a rendszer összenergiája a termodinamika szintjén a rendszer T hőmérsékleteként mérhető, így a β paraméter a T hőmérséklettel kell, hogy kapcsolatba legyen. Ez a kapcsolat legegyszerűbben a korrespondencia elv segítségével kapható meg. Eszerint ugyanis nagy energiaszinteken, ahol a kvantálás már elhanyagolható, a kvantummechanika statisztikus törvényének (Fermi-Dirac és Bose-Einstein) a klasszikus statisztika törvényébe (Maxwell) kell átmennie. Ez akkor teljesül ha a β paraméter a T hőmérséklet reciprokával arányos, azaz $\beta = 1/kT$ (ahol „ k ” a Boltzmann állandó).

Az α paraméter meghatározása az N összrészecskeszám állandóságából határozható meg. Az előbbihez hasonló általános megoldás most nincsen. Részleteket csak a $g(\varepsilon)$ állapotsűrűség konkrét ismeretében tudunk mondani, hiszen az N elméleti úton történő meghatározásához kell az állapotsűrűség. Az α paraméter helyett bevezetjük a μ „kémiai potenciált” az $\alpha = -\mu/kT$ definícióval. A továbbiakban mindig ezt fogjuk használni. Mivel az α szerepét mostantól a μ veszi át, ezért ennek az értékét kell majd a rendszer részecskéinek a számából meghatározni.

Az eloszlásfüggvényre kapott eredményeinket egy egységes matematikai formába írhatjuk:

$$f(\varepsilon, T) = \left[\exp\left\{ \frac{\varepsilon - \mu}{kT} \right\} + \delta \right]^{-1},$$

ahol $\delta = +1$ esete a Fermi-Dirac, $\delta = -1$ pedig a Bose-Einstein statisztikát adja. Látható az is, hogy a $\delta = 0$ esetében éppen a klasszikus statisztikus mechanikában tanult Maxwell-féle eloszláshoz jutunk. Ez azért megnyugtató, mert így a statisztikák területén is teljesül a korrespondencia elv. Azaz a kvantumstatisztikák határesetben (magas energiaszinteken) visszaadják a klasszikus fizikában tapasztalt eredményeket.

A μ kémiai potenciál fizikai tartalmának a megértése nagyon lényeges a kvantumstatisztikák alkalmazása szempontjából. Ezért ezt egyszerű modellrendszerek példáján keresztül próbáljuk tisztázni.

A Fermi-Dirac statisztika, mint azt láttuk, fermionokra érvényes. Az elektronok fermionok. Ezért a szilárd testek elektromos tulajdonságainak a tárgyalásánál mindig ezzel a statisztikával találkozunk. Tekintsünk egy olyan elektronrendszert, amelynek az állapotsűrűségét egy monoton növekedő $g(\varepsilon)$ függvény írja le. Ha a rendszer alapállapotban van, azaz a hőmérséklete $T=0$ Kelvin, akkor az állapotok betöltöttségét megadó $f^{FD}(\varepsilon, T=0)$ Fermi-Dirac eloszlásfüggvény egy lépcsőfüggvény lesz. Ez azt jelenti, hogy alapállapotban az elektronok egy bizonyos $\varepsilon_F(0)$ energiaszintig minden állapotot betöltenek azon felül pedig minden állapot üres lesz. Ennek az energiaszintnek a neve „Fermi-szint” vagy „Fermi energia”. Látható, hogy éppen ez a Fermi energia felel meg a μ kémiai potenciálnak. Az $\varepsilon_F(0)$ meghatározása abból a feltételből adódik, hogy az állapotokat betöltő elektronok száma N .

Ha növekszik a rendszer hőmérséklete, akkor ez azt jelenti, hogy az elektronok az alacsonyabb energiájú állapotokból magasabb energiájú állapotokba ugranak. Ez tükröződik az $f^{FD}(\varepsilon, T)$ eloszlásfüggvény alakjában is. Fermi energiának most azt az $\varepsilon_F(T)$ energiaszintet hívjuk, amelynél az eloszlásfüggvény 1/2 értéket vesz fel. Az eloszlásfüggvény „szimmetrikus” a Fermi szint környezetében. Ez azt jelenti, hogy ha a $g(\varepsilon)$ állapotsűrűség állandó volna, akkor a hőmérséklet emelkedésével az $\varepsilon_F(0)$ Fermi szint alatt kiürülő állapotok száma éppen megegyezne az $\varepsilon_F(0)$ fölött betöltődő állapotok számával. Az elektronok N száma tehát nem változna, ahogyan annak lennie is kell. Ha a $g(\varepsilon)$ állapotsűrűség (mint a mi példánkban is) egy monoton növekvő függvény, akkor a Fermi szintet csökkenteni kell ahhoz, hogy a kiürülő és az újonnan

betöltődő állapotok száma megegyezzen. Azaz ahhoz, hogy az N összelektronszám állandó maradjon az kell, hogy az $\varepsilon_F(T)$ csökkenjen az $\varepsilon_F(0)$ -hoz képest.

Tekintsünk most egy bozonokból álló rendszert! Legyen a $g(\varepsilon)$ (spinpálya)állapotsűrűség függvény olyan, hogy az egy bizonyos ε_0 érték alatt zérus, felette pedig monoton növekedő. Az ε_0 érték akár zérusnak is választható. Hogyan töltődnek be ezek az állapotok? Vizsgáljuk meg először az $f^{BE}(\varepsilon, T)$ Bose-Einstein eloszlásfüggvény matematikai tulajdonságait! Látható, hogy ha az ε energia a μ kémiai potenciálnál kisebb, akkor az eloszlásfüggvény értéke negatív (!). Ez azonban az eloszlásfüggvény fizikai jelentése miatt lehetetlen. Negatív számú részecske ugyanis értelmetlen dolog! Mindebből következik, hogy a μ kémiai potenciálnak mindig kisebbnek (!) kell lennie mint az ε_0 érték.

Tegyük fel, hogy a bozonok száma a rendszerben a T hőmérséklet csökkenésével nem változik. Ekkor a μ kémiai potenciál értékét növelnünk kell ahhoz, hogy ezt a feltételt teljesíteni tudjuk. Tegyük fel, hogy a kémiai potenciál éppen a T_0 hőmérsékleten éri el az ε_0 értéket azaz $\mu(T_0) = \varepsilon_0$! Mivel a kémiai potenciál nem emelkedhet az ε_0 fölé, ezért a kémiai potenciál értékét továbbra is az ε_0 értéken kell tartanunk azaz $\mu(T \leq T_0) = \varepsilon_0$. Tehát a T_0 hőmérséklet alatt a bozonszám állandóságát matematikailag már nem tudjuk teljesíteni.

Ezek után a továbblépéshez két lehetőség kínálkozik.

Az első az, hogy keresünk olyan bozonrendszereket, amelyekben a bozonok száma a hőmérséklet csökkenésével szintén csökken. Mint azt majd a következő fejezetekben részleteiben is látni fogjuk ilyenek valóban léteznek, sőt a mindennapi életben találkozunk is velük (bár eddig ezt még nem tudtuk).

A másik lehetőség talán még érdekesebb és különösen az alacsony hőmérsékletű fizikában van jelentősége. Tétélezzük fel ugyanis, hogy a bozonok nem tűnhetnek el a rendszerből, azaz a számuk állandó kell, hogy maradjon. Ha most megvizsgáljuk az $f^{BE}(\varepsilon, T)$ eloszlásfüggvény viselkedését az $\varepsilon \geq \varepsilon_0$ értékekre a $T_0 \geq T \rightarrow 0$ esetén, akkor azt látjuk, hogy az eloszlásfüggvény az ε_0 pontban igen "élesen" a végtelenhez tart. Ez a meredek növekedés az ε_0 érték igen kis környezetére korlátozódik. Tudjuk azonban azt, hogy a kvantumstatisztikáknál bevezetett folytonos energiaskála használata válójában csak nagy energiákon indokolt. Alacsony energián az energiaszintek kvantáltsága már nem mosható el. Ez igaz most is. Azaz az ε_0 környezetében vissza kell térnünk a diszkrét energiaskálára. Ez pedig azt jelenti, hogy ha a hőmérséklet eléri a 0 értéket, akkor minden bozon az ε_0 energiájú alapállapotba kerül (ahogyan azt a 77. oldalon található bevezetőben már említettük is). A $T_0 \geq T \rightarrow 0$ folyamat során bozonok az ε_0 energiájú alapállapotba kezdenek felhalmozódni, tehát az összmennyiségük nem változik. A folyamat hasonlít egy fázisátalakuláshoz, ahol az egyik fázist (pl. a folyadékot) az ε_0 energiájú bozonok, a másik fázist (pl. a gázt) az ennél nagyobb energiájú bozonok alkotják. A jelenség neve Bose kondenzáció. A Bose kondenzáció alapján érthető meg pl. az abszolút zérus fok közelében fellépő szupervezetés, vagy a szuperfolyékonyság jelensége.

1.5.5. Bozonokból álló rendszer

A elektromágneses hullámok és a kvantummechanikai foton fogalma azt sugallja, hogy bármilyen klasszikus fizikai hullámjelenség a kvantummechanikában bozonokból álló rendszerként írható le. Most arra fogunk példákat látni, hogy a sejtésünk valóban helytállóan bizonyul. Ezt a szilárd testekben fellépő mechanikai (ezen belül is az akusztikus) hullámok esetében fogjuk megvizsgálni. Mind az elektromágneses, mind pedig az akusztikus hullámok közös jellemzője az, hogy eleget tesznek az $\omega = ck$ diszperziós összefüggésnek. Ez egyben azt is jelenti, hogy pontosan ugyanolyan típusú hullámegyenletet elégítenek ki. Ezért (nagyreszt) közös módon tárgyalhatók. A különbségek az esetleg eltérő speciális perem- illetve mellékfeltételekben lehetnek. Tekintsünk egy kocka alakú zárt rendszert, amelyben a fenti tulajdonságú állóhullámok (ún. módusok) alakulhatnak ki. Ez lesz a rendszer egy rezgési állapota. A peremfeltételekkel megadjuk a "rezgő fizikai mennyiség" (elektromos tér, vagy elmozdulás) értékét a kocka felülete mentén. A diszperziós reláció és a peremfeltételek együttesen meghatározzák azt, hogy adott frekvencián hányféle módus lehetséges ebben a kocka alakú rendszerben. Az adódik, hogy egy módust három nem negatív egész számmal az

(n_x, n_y, n_z) -vel tudunk jellemezni. Ezért az $\{n_x, n_y, n_z\}$ koordináta rendszerben egy módot egy pont reprezentál. Bevezethető az $N(\omega)$ (térbeli)állapotsűrűség fogalma. Az $N(\omega) d\omega$ kifejezés megadja az $(\omega, \omega + d\omega)$ frekvenciatartományban lévő térbeli módusok számát. Tekintsük az ezeket a módusokat reprezentáló pontok halmazát az $\{n_x, n_y, n_z\}$ koordináta rendszerben. A diszperziós reláció következtében ezek a pontok egy gömbhéj nyolcadban fognak elhelyezkedni. Mivel az (n_x, n_y, n_z) számok csak nemnegatív egész számok lehetnek, így egy egységnyi térfogatban csak egy "móduspont" található. Ezért tehát az $(\omega, \omega + d\omega)$ frekvenciatartományban lévő térbeli módusok száma pontosan a gömbhéjnyolcad térfogatával lesz egyenlő. Ez pedig éppen az $N(\omega)$ (térbeli) állapotossűrűséget határozza meg. Eredményül azt kaptuk, hogy lineáris diszperziós törvény esetén az állapotossűrűség a frekvencia négyzetes függvénye lesz, azaz $N(\omega) \propto \omega^2$. Ez az összefüggés tehát mind az elektromágneses hullámokra, mind pedig az makroszkopikus akusztikus mechanikai hullámokra érvényes. Minden térbeli módus még különféle polarizációjú is lehet (hiszen mind az elektromágneses tér, mind pedig az elmozdulás vektor mennyiség!) Ezért a tényleges $g(\omega)$ állapotossűrűséget úgy kapjuk meg, hogy az $N(\omega)$ térbeli módussűrűséget megszorozzuk a lehetséges polarizációs állapotok d_s számával.

OROSZ L. Kvantummechanika 84.oldal

1.5.5.1. Fotongáz

Alkalmazzuk az eddigieket egy kocka alakú üregben gerjesztett elektromágneses állóhullámok kvantummechanikai leírására! (A probléma a hőmérsékleti sugárzás elméleti vizsgálatánál már szerepelt, ezért ismerős kell, hogy legyen!)

Az elektromágneses tér kvantummechanikai tárgyalására vezettük be a foton fogalmát. Eszerint az elektromágneses tér energiája csak $\hbar\omega$ energiaadagokban változtatható. Ezt az energiaadagot neveztük el fotonnak. A „T” hőmérsékletű falban ω frekvenciával rezgő töltések (mint atomi sugárzó „antennák”) hatására, az üregben ω frekvenciájú elektromágneses állóhullámok (módusok) alakulnak ki. Egy ω frekvenciájú módus energiája attól függ, hogy a kis atomi oszcillátorok mennyi $\hbar\omega$ fotont adtak át az üregnek. Ezért az üregben lévő módusok energiája kvantált és két szomszédos energiaszint közötti különbség $\hbar\omega$. Ha az ω frekvenciájú módus energiája $\frac{1}{2}\hbar\omega + n\hbar\omega$, akkor ez azt jelenti, hogy a rendszerben „n” darab foton van jelen. Tehát az ω frekvenciájú módusok energiáját a $\hbar\omega$ energiájú fotonok számával fejeztük ki.

Egy adott ω frekvencián a lehetséges módusok számát az $N(\omega) \propto \omega^2$ állapotossűrűség határozza meg. A kvantumstatisztika szerint, a $\hbar\omega$ energiájú fotonok számát T hőmérsékleten a Bose-Einstein féle eloszlásfüggvény adja meg. Az üregbe fotonok lépnek be, illetve távoznak el annak megfelelően, hogy az egyes (elektromágneses hullám) módusok energiája csökken vagy növekszik. Tehát a rendszerben a fotonok száma nem állandó. Mint azt az előzőekben láttuk, így a kémiai potenciálnak állandónak kell lenni. Az $N(\omega) \propto \omega^2$ állapotossűrűség miatt a kémiai potenciál értékét zérusnak kell választani. Kvantumstatisztikai fogalmakban gondolkodva szemléletesen azt mondhatjuk, hogy az üregben T hőmérsékletű, zérus kémiai potenciálú fotongáz van jelen, amelynek tulajdonságait a Bose-Einstein féle statisztikai törvények határozzák meg.

Ezek után a rendszer összenergiája, azaz az ω frekvenciájú módusok energiája egyszerűen meghatározható. Eredményül a már jól ismert Planck féle összefüggésre jutottunk, ahogyan az várható is volt.

1.5.5.2. Fonongáz

Tekintsünk egy kocka alakú merev fallal határolt, rugalmas, szilárd anyagot. Külső gerjesztés hatására az anyagban rugalmas állóhullámok alakulnak ki. A $g(\omega)$ állapot-sűrűséget úgy kapjuk meg, hogy az $N(\omega) \propto \omega^2$ térbeli módussűrűséget megszorozzuk $d_s=3$ -al a lehetséges polarizációs állapotok számával. Ugyanis kétféle transzverzális és egyféle longitudinális hullám terjedhet egy szilárd anyagban. Ha a kvantummechanikai tárgyalásra akarunk áttérni, akkor már valahogyan figyelembe kell venni a szilárd test atomos szerkezetét is. Ha a szilárd test N darab atomból áll, akkor a mechanika szerint $3N$ féle rezgési állapota létezik, hiszen egy $3N$ szabadságfokú rendszerről van szó. Ez azt jelenti, hogy a $g(\omega) \propto \omega^2$ állapot-sűrűségnek egy maximális ω_D frekvencia felett zérusnak kell lenni. Az ω_D ún. Debye [kiejtése: "döbáj"] frekvencia értékét úgy kell megadnunk, hogy az összes lehetséges módusok száma éppen $3N$ legyen. Azt, hogy kell léteznie egy maximális frekvenciaértéknek (azaz, hogy egy módus frekvenciája nem lehet akármekkora) fizikailag egyszerűen belátható. Ugyanis, az atomi szerkezet miatt egy rugalmas hullám fél-hullámhossza nem lehet kisebb az atomok közötti rácsávolságnál (szemléletesen szólva két atom között nincsen ami hullámzana). A lehetséges minimális hullámhossz egy maximális frekvenciának felel meg.

A rendszer kvantummechanikai tárgyalásának a gondolatmenete ezek után teljesen megegyezik az elektromágneses hullámoknál tanultakkal. Az egyetlen különbség az, hogy most a rugalmas (hullám) módusok egy $\hbar\omega$ energiaadagját "fononnak" nevezzük.

Kvantumstatisztikai fogalmakban gondolkodva szemléletesen azt mondhatjuk, hogy T hőmérsékletű szilárd testben, zérus kémiai potenciálú fonongáz van jelen, amelynek tulajdonságait a Bose-Einstein féle statisztikai törvények határozzák meg.

Ezek után a T hőmérsékletű fonongáz összenergiája kiszámítható. Az összenergia értéke függeni fog a $g(\omega)$ állapot-sűrűségben megjelenő ω_D Debye frekvenciától is. Ezen frekvencia helyett inkább a $\hbar\omega_D = k\theta_D$ összefüggéssel definiált θ_D ún. Debye hőmérsékletet szokás használni. Ha a T hőmérséklet sokkal kisebb mint a Debye hőmérséklet, akkor az összenergia a T hőmérséklet 4-ik hatványával lesz arányos.

Az eddigiek segítségével kiszámíthatjuk a szilárd testek fajhőjét. Az ilyen módon kapott elméleti eredmények a kísérleti tapasztalatokkal összehasonlíthatók és így számot adhatunk az elméleti modell helyességéről.

Tekintsünk egy mólnyi mennyiségű szilárd testet. Számítsuk ki ennek a testnek a mólhőjét (moláris hőkapacitását) a klasszikus statisztikus fizika szerint. A szilárd test N_A (Avogadro számnyi) iontörzsből és (az egyszerűség végett) ugyanennyi elektrontól áll. Modellezzük a szilárd testünket, mint az iontörzsek és az elektronok egymással termikus egyensúlyban lévő rendszerét. Az ekvipartíció tétele (klasszikus statisztika!) segítségével ki tudjuk számolni a teljes rendszer összenergiáját. Az iontörzsek rezgő mozgást végeznek, tehát a termodinamikai szabadságfokuk 6. Az elektronok közel szabadon mozognak, így a termodinamikai szabadságfokuk 3. A rendszer összenergiájára így $9/2 RT$ érték adódik. Az állandó térfogaton mért mólhőre ezért $9/2R$ -et kapunk. A mérések szerint azonban ez az érték $6/2R$. Ezt nevezik Dulong-Petit [kiejtése: "dülong-pit"] törvénynek.

A klasszikus statisztikus fizika tehát helytelen eredményt ad. De ez még nem minden! A termodinamika harmadik főtétele szerint minden fajhőnek az abszolút zérus közelében zérushoz kell tartani. Mindezt a mérések is igazolják. Ugyanakkor a klasszikus statisztikus fizika szerint a részecskék szabadságfoka független a hőmérséklettől és így a fajhőnek is állandónak kellene maradnia. Mindezek az ellentmondások már jóval a kvantummechanika megszületése előtt ismeretesek voltak és jelezték azt, hogy valami itt nincsen rendben. A helyes választ mindkét kérdésre csak a kvantumstatisztikák tudták adni.

A szilárd test mólhőjét az iontörzsekből álló rendszer mólhőjének és a szabadelektronok mólhőjének az összege adja. Határozzuk meg először az iontörzsek mólhőjárulékát. Az előző oldalon már a kvantummechanika segítségével kiszámítottuk a rezgő rendszer összenergiáját. Így a mólhő ennek a hőmérséklet szerinti első deriváltjaként számítható. Az eredmény az, hogy az iontörzsek mólhőjáruléka alacsony hőmérsékleten T^3 hatvány szerint valóban zérushoz tart. Magasan a Debye hőmérséklet fölött pedig a klasszikus $6/2R$ eredményt adja. Látható, hogy csak akkor kapunk a tapasztalattal egyező eredményt, ha feltételezzük, hogy az elektronok fajhőjáruléka elhanyagolható. Ezt a szilárdtestfizikai részben bizonyítani is fogjuk.

A szilárd testek fajhőjének a helyes kiszámítása a kvantumstatistikák alkalmazásának egyik igen szép sikere.

OROSZ L. Kvantummechanika 88.oldal

1.6. A kovalens kémiai kötés

A kovalens kémiai kötésről, már a középiskolai (sőt az általános iskolai!) kémia tantárgyban részletesen volt szó. Ennek a fejezetnek az a célja, hogy megteremtse a kapcsolatot az eddig tárgyalt precíz kvantummechanikai ismereteink és a kémiában tanultak között.

1.6.1. A molekulapályák

1.6.1.1. Egydimenziós modell

Két atom között létrejövő kovalens kémiai kötést már egydimenziós modellen is szemléltetni tudjuk. Az egydimenziós atomot egy potenciálgödörrel fogjuk modellezni. Legyen ebben az "atomban" az elektron energiája E_o . Ha két atom egymástól nagyon nagy távolságra van, akkor a két Ψ_A és Ψ_B elektronfelhő nem zavarja egymást, azaz két független atomunk van. Ha a két "atom" elegendően közel kerül egymáshoz, akkor már egy kvantummechanikai rendszernek kell őket tekinteni. Egy kettős potenciálgödört kapunk. Felrajzolhatjuk a kötött állapothoz tartozó megoldásokat. Az egydimenziós Schrödinger egyenlet általános matematikai tulajdonságainak az ismeretében ez könnyen megtehető.

Látható, hogy lesz egy olyan Ψ_K kötött állapot amelynek az E_K energiája egy kissé az E_o alá fog esni. Ennek az oka a következő. Mivel E_K valamivel kisebb, mint E_o , ezért a potenciál gödörben az elektron impulzusa kisebb, tehát a Ψ_K hullámfüggvény lassabban fog változni. De ez azt jelenti, hogy a két gödört elválasztó falban a Ψ_K hullámfüggvény a szabad atomi hullámfüggvények (Ψ_A, Ψ_B) felett fog menni. A szimmetria miatt Ψ_K a potenciálgát középpontjára nézve egy páros függvény lesz.

Láthatóan lesz egy Ψ_L állapot is, amelynek az E_L energiája egy kissé az E_K fölé fog kerülni. Ennek az oka a következő. Mivel E_L valamivel nagyobb, mint E_o , ezért a potenciál gödörben az elektron impulzusa nagyobb, tehát a Ψ_L hullámfüggvény gyorsabban fog változni. De ez azt jelenti, hogy a két gödört elválasztó falban a Ψ_L hullámfüggvény a szabad atomi hullámfüggvények (Ψ_A, Ψ_B) alatt fog menni. A szimmetria miatt Ψ_L a potenciálgát középpontjára nézve egy páratlan függvény lesz.

Ψ_K állapot esetén az elektron felhő a két atom közötti térben (a potenciálgátban) véges értékű, ezért ez egy ún. „kötő pálya” lesz. A Ψ_L állapot esetén az elektron felhő a két atom közötti térben (a potenciálgát középpontjában) zérus értékű, ezért ez nem hozhat létre kötést. Ezt hívják „lazító (vagy nem kötő) pályának”. Mivel mind a Ψ_K mind pedig a Ψ_L állapot mind a két atomra kiterjed, ezért ezeket "molekula pályáknak" is hívják.

Látható, hogy a molekula pályák a molekulát alkotó két atom Ψ_A és Ψ_B atompályáiból alkalmas lineáris kombinációval közelítőleg létrehozhatók.

Általánosságban is elmondhatjuk, hogy két atom közelítésekor a szabad atomi energiaszint két közeli energiaszintre hasad fel. Az alacsonyabb energiájú a kötő pályákat, a magasabb energiájú a lazító pályákat adja.

1.6.1.2. A hidrogén molekula ion

Most egy reális fizikai feladat kapcsán bevezetjük a kémiában gyakran használt és a molekulapályákkal kapcsolatos, fontosabb jelöléseket és elnevezéseket. A lehető legegyszerűbb, a természetben létező molekula a H_2^+ hidrogén molekula ion. Ez két atommagot (jelesül protont) tartalmaz (ettől lesz molekula) de csak egyetlen elektronja van (ezért tudjuk elvileg pontosan kiszámolni). Az elektron két, egymástól R távolságra lévő proton terében mozog. Kezdetben tekintsük R értékét adottnak. Az elektron Hamilton operátora egyszerűen megadható. Az ennek alapján felírt Schrödinger egyenlet megoldásai lesznek a keresett molekulapályák.

A feladat pontosan megoldható, ha ún. hengersizmetrikus konfokális koordináta rendszerben dolgozunk. Itt a koordináta felületek konfokális (=azonos fókuszú) forgási ellipszoidok illetve forgási hiperboloidok. A koordinátákat pedig $\{\nu, \mu, \varphi\}$ betűkkel jelöljük. Látható, hogy $R \rightarrow 0$ esetben a koordináta rendszerünk a gömbi koordináta rendszerbe megy át.

A hullámfüggvény szeparálható és a Schrödinger egyenlet a polinom módszerrel megoldható. A megoldás során három kvantumszám jelenik meg, az (n, l, m_l) . Ezek ugyanolyan értékeket vesznek fel mint a hidrogén atom esetén és a fizikai tartalmuk is ugyanaz. Van azonban egy lényeges különbség. Ez pedig az, hogy amíg a hidrogén atom gömbszimmetrikus, addig a hidrogénmolekula ion egy hengersizmetrikus molekula. A két proton által definiált egyenes lesz a „z” tengely. Így a perdület vektornak e tengely irányába számított vetülete lesz az L_z komponens. Az $|m_l| = 0, 1, 2, \dots$ különböző értékeinél fellépő állapotokat most betűjellel látjuk el, ezek lesznek (sorrendben) a $\sigma, \pi, \delta, \dots$ pályák.

A különböző molekulapályák energiáját a R protontávolság függvényében felrajzolva ellenőrizhetjük az eredményeink helyességét. Ugyanis $R=0$ esetén a két proton egy helyen van, tehát egy hélium iont kapunk. Az $R \rightarrow \infty$ esetén pedig egy hidrogén atomból és egy tőle független protonból álló rendszerhez jutunk. Mindkettő megoldásait már az előzőekből is merjük. Ezeket kell, hogy visszakapjuk most is. A H_2^+ molekula ion teljes energiáját úgy kapjuk meg, hogy az elektron energiájához hozzáadjuk a két proton között fellépő taszításból származó potenciális energiát is. Ezek után felrajzolható a rendszer összenergiája mint a protonok közötti R távolság függvénye. A két legalacsonyabb energiájú ($1s\sigma$ és $2p\sigma$) állapothoz tartozó jellegzetes görbe az $R \rightarrow \infty$ esetén ugyanahhoz az energiaszinthez tart. Ennek a fizikai tartalma könnyen megérthető. Helyezzünk el egymástól nagyon nagy R (kb. végtelen) távolságra egy hidrogén atomot és egy protont. Ekkor a két objektum olyan távol van egymástól, hogy közöttük nem lép fel kölcsönhatás. A rendszer energiája a hidrogén atom alapállapotú energiájával fog megegyezni. Ha csökkentjük az R távolságot, akkor az elektron érezni kezdi a másik proton hatását is. A kezdeti szabad atomi energiaszint felhasad (ugyanúgy, ahogyan azt az egydimenziós és eléggé „mesterkélt” bevezető modellben láttuk). Tovább csökkentve az R távolságot az $1s\sigma$ kötőpálya esetén a rendszer egy minimális energia értéket vesz fel. Ez lesz a rendszer (stabil) alapállapota. Ha megvizsgáljuk a két pályához tartozó elektronfelhőt, akkor azt tapasztaljuk, hogy lazító pálya esetén a két protont összekötő egyenes felezősíkjában az elektronfelhő zérus lesz. Ugyanígy, mint az egydimenziós modell esetén.

1.6.2. A molekulapályák felépítése atompályákból

A molekulapályák kiszámítása legtöbbször igen nehéz feladat. Ezért közelítő módszereket szoktunk használni. Már az egydimenziós modell esetén láttuk, hogy a molekulapályák atomi pályákból közelítőleg felépíthetők. Ezt szoktuk használni a reális molekula számítások esetén is.

Az ábrán azt mutattuk be, hogy hogyan lehet atomi „s” és „p” állapotokból kötő és lazító „ σ ” és „ π ” molekulapályákat létrehozni.

A lazító pályák jellegzetessége az, hogy a molekulát alkotó két atom közötti felezősíkjában az elektronfelhő zérus lesz.

